

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

ERICK GIOVANI SPERANDIO NASCIMENTO

**DESENVOLVIMENTO DE FERRAMENTAS
COMPUTACIONAIS PARA SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE
GASES LIBERADOS POR VEÍCULOS ESPACIAIS NO
CENTRO DE LANÇAMENTO DE ALCÂNTARA**

VITÓRIA

2016

ERICK GIOVANI SPERANDIO NASCIMENTO

**DESENVOLVIMENTO DE FERRAMENTAS
COMPUTACIONAIS PARA SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE
GASES LIBERADOS POR VEÍCULOS ESPACIAIS NO
CENTRO DE LANÇAMENTO DE ALCÂNTARA**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Ambiental.

Área de Concentração: Poluição do Ar

Orientador: Prof. Dr. Davidson Martins
Moreira.

Coorientadora: Prof^a. Dr^a. Taciana Toledo de
Almeida Albuquerque.

VITÓRIA

2016

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Setorial Tecnológica,
Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

N244d Nascimento, Erick Giovani Sperandio, 1981-
Desenvolvimento de ferramentas computacionais para
simulação da dispersão de gases liberados por veículos
espaciais no Centro de Lançamento de Alcântara / Erick Giovani
Sperandio Nascimento. – 2016.
179 f. : il.

Orientador: Davidson Martins Moreira.

Coorientador: Taciana Toledo de Almeida Albuquerque.

Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Universidade
Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Ar – Poluição. 2. Veículos espaciais – Poluentes –
Dispersão. 3. Nuvens de exaustão. 4. Modelagem computacional.
5. Modelo MSRED. 6. Modelo CMAQ. 7. Modelo WRF. I. Moreira,
Davidson Martins. II. Albuquerque, Taciana Toledo de Almeida.
III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico.
IV. Título.

CDU: 628



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

“Desenvolvimento de ferramentas computacionais para simulação da dispersão de gases liberados por veículos espaciais no Centro de Lançamento de Alcântara”.

ERICK GIOVANI SPERANDIO NASCIMENTO

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Davidson Martins Moreira
Orientador – PPGEA/CT/UFES

Profa. Dra. Taciana Toledo de Almeida Albuquerque
Coorientadora – PPGEA/CT/UFES

Profa. Dra. Jane Méri Santos
Examinador Interno – DEA/CT/UFES

Prof. Dr. Neyval Costa Reis Jr.
Examinador Interno – DEA/CT/UFES

Prof. Dr. Gilberto Fernando Fisch
Examinador Externo – IAE

Prof. Dr. Antônio Gledson de Oliveira Goulart
Examinador Externo – FURG

Em conformidade com as normas prescritas na portaria normativa nº. 02/2016, a assinatura do membro externo (Prof. Dr. Antônio Gledson de Oliveira Goulart) é representada neste documento pela respectiva assinatura do presidente da comissão julgadora, o Prof. Dr. Davidson Martins Moreira.

Coordenador do PPGEA: Prof. Dr. Edmilson Costa Teixeira
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
Vitória, ES, 11 de outubro de 2016.

Av. Fernando Ferrari, 514 Campus Universitário, Goiabeiras - Vitória - ES - CEP 29075-910 - Tel. (27) 3335 2324 - Ramal *5110.

DEDICATÓRIA

Ao meu Deus

À minha esposa Rosiane

Aos meus orientadores Davidson e Taciana

À minha família e amigos

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, a Deus por tudo que sou, por até aqui ter chegado, por todas as conquistas, pela força que me deu e por ter me carregado nos momentos mais difíceis, a Ele seja dada toda a honra e toda a glória, pois a Ele tudo pertence.

À minha família, em especial ao meu pai, minha mãe (*in memoriam*) e meus irmãos.

À minha amada esposa Rosiane Sacht Pereira Sperandio, que me apoiou e continua me apoiando, desde os momentos mais felizes até os mais difíceis. Os desafios foram muitos, mas ela esteve ali firme e forte ao meu lado.

Ao meu orientador Prof. Dr. Davidson Martins Moreira, que depositou em mim grande confiança, concedendo-me apoio e aconselhamento em todos os momentos em que precisei. Sem a sua guia e sua orientação esta tese jamais teria se concretizado. E, mais ainda, pela inestimável amizade e parceria que se desenvolveu ao longo destes 4 anos, e que com certeza perdurará por muitos anos porvir.

À minha coorientadora Prof^a. Dr^a. Taciana Toledo de Almeida Albuquerque, por ter me apoiado desde o início, dando valiosos conselhos e orientações. Sua amizade e seu apoio foram fundamentais na realização deste projeto.

Aos professores Dr. Neyval da Costa Reis Júnior e Dr^a. Jane Meri Santos pela confiança em mim depositada e pelas valiosas contribuições feitas a este trabalho.

Aos meus colegas pesquisadores do laboratório NQUALIAR, pelas experiências trocadas e pelas oportunidades de aprendizado, em especial aos Srs. Igor Baptista Araújo, Rizzieri Pedruzzi e Ayres Geraldo Loriato.

À Universidade Federal do Espírito Santo e ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental (PPGEA) pela infraestrutura acadêmica disponibilizada, e à secretária do PPGEA, a Sra. Rose Mary Nunes Leão.

Ao prof. Dr. Gilberto Fernando Fisch, que auxiliou neste trabalho, fornecendo dados meteorológicos de radiossondagem e outras informações da região de Alcântara, MA, Brasil. Também, pelo suporte fornecido para que eu pudesse visitar o Centro Tecnológico da Aeronáutica em São José dos Campos, SP, onde foi possível trocar muitas experiências com os colegas, notadamente o Sr. Daniel Andrade Schuch.

À CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO

Durante o lançamento de foguetes e veículos espaciais, grandes e quentes nuvens de exaustão são geradas próximo ao solo, e são compostas por poluentes atmosféricos tais como alumina, monóxido de carbono e cloreto de hidrogênio. Este processo leva alguns segundos para ocorrer, e geralmente áreas povoadas localizadas próximas ao centro de lançamento podem ser expostas a grandes níveis de concentração de poluentes em uma janela de tempo de poucos minutos a menos de poucas horas. Devido à especificidade da representação do termo fonte – que neste caso é a nuvem de exaustão – e uma vez que um receptor pode ser impactado em menos de uma hora, modelos de qualidade do ar usuais não foram projetados para lidar com tal problema único. Além disso, a nuvem pode ser transportada a locais mais distantes, podendo assim impactar receptores em escalas de tempo e espaço maiores. Portanto, os centros de lançamento ao redor do mundo precisam avaliar operacionalmente o impacto de curto e longo alcance de eventos de lançamento de foguetes no ambiente através da modelagem meteorológica e de qualidade do ar. Para este fim, este trabalho apresenta o desenvolvimento de um novo modelo computacional denominado MSRED – “*Model for Simulating the Rocket Exhaust Dispersion*”, que em português significa “modelo para simulação da dispersão da exaustão de foguetes”. Ele foi concebido com base numa solução tridimensional semi-analítica da equação de difusão-advecção, incorporando uma moderna parametrização tridimensional da turbulência atmosférica, tendo sido projetado para simular a formação, ascensão, expansão, estabilização e dispersão de nuvens de exaustão de foguetes, com o objetivo de avaliar seu impacto de curto alcance, sendo capaz de ler dados meteorológicos diretamente da saída do modelo WRF (*Weather Research and Forecasting*). E, para a modelagem de longo alcance e do transporte químico, o MSRED foi construído para se integrar ao modelo CMAQ (*Community Multiscale Air Quality*) através da geração do arquivo de condições iniciais pronto para entrada no modelo. Foram realizadas simulações e análises a fim de avaliar a aplicação deste sistema integrado de modelagem para diferentes casos de lançamento de foguetes e em diferentes condições atmosféricas, para a região do Centro de Lançamento de Alcântara (CLA, o portal espacial brasileiro). Este sistema híbrido, moderno e multidisciplinar é a base de uma estrutura de modelagem que pode ser utilizada operacionalmente em qualquer centro de lançamento do mundo para simulações e análises pré e pós-lançamento dos efeitos ambientais de operações de lançamento de foguetes.

Palavras-chave: MSRED, CMAQ, WRF, modelagem da dispersão de poluentes, nuvem de exaustão de foguete, poluição do ar.

ABSTRACT

During the launch of rockets and spacecrafts, huge and hot clouds are generated near the ground level, and are composed by buoyant exhaust products, such as alumina, carbon monoxide and hydrogen chloride. This process takes a few minutes to occur, and generally populated areas nearby the launching center may be exposed to high levels of hazardous pollutant concentrations within few minutes to less than a couple of hours. Due to the specificity of the representation of the source term – which is the rocket exhaust cloud – and since a receptor can be impacted in less than one hour, common air quality models were not designed to deal with such a unique problem. Furthermore, the cloud may be transported to farther distances and impact receptors in longer time and space scales. Thus, the launching centers around the globe, like spaceports, need to operationally assess the short and long range impacts of rocket launch events in the environment through meteorological and air quality modeling. For this end, this work presents the development of a new model called *Model for Simulating the Rocket Exhaust Dispersion* – MSRED. It is based on a semi analytical three dimensional solution of the advection-diffusion equation, incorporating a modern three dimensional parameterization of the atmospheric turbulence, designed to simulate the formation, rise, expansion, stabilization and dispersion of rocket exhaust clouds for short range assessment, being able to directly read meteorological data from WRF (*Weather Research and Forecasting*) model output. And, for the long range and chemical transport modelling, the MSRED was built to be integrated to the *Community Multi-scale Air Quality* (CMAQ) model, by generating a ready-to-use initial conditions file to be input to CMAQ. Simulations and analysis were carried out in order to evaluate the application of this integrated modeling system for different rocket launch cases and atmospheric conditions, for the Alcântara Launching Center (CLA, the Brazilian gate to the space) region. This hybrid, modern and multidisciplinary system is the basis of a modeling framework that can be operationally employed at any launching center in the world, for pre- and post-launching simulations of the environmental effects of rocket operations.

Keywords: MSRED, CMAQ, WRF, pollutant dispersion modeling, rocket exhaust cloud, air pollution.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	20
2. REVISÃO DA LITERATURA	24
2.1 O MODELO REEDM.....	25
2.2 O MODELO OBODM.....	28
2.3 O MODELO SARRIM.....	29
2.4 O MODELO PLUMETRACKER.....	30
2.5 O MODELO MSDEF.....	31
2.5.1 Descrição Matemática do MSDEF.....	33
2.5.2 Solução Analítica Utilizando a Transformada de Laplace	36
2.5.3 Equação Unidimensional Transiente.....	36
2.5.4 A Solução da Equação do Modelo MSDEF.....	40
2.6 OUTRAS FERRAMENTAS DE MODELAGEM DE NUVENS DE EXAUSTÃO DE FOGUETES	41
2.7 A REGIÃO DO CENTRO DE LANÇAMENTO DE ALCÂNTARA	44
2.8 A CAMADA LIMITE ATMOSFÉRICA.....	47
2.9 DESCRIÇÃO DO TRANSPORTE DE POLUENTES NA ATMOSFERA.....	51
2.9.1 Abordagem Euleriana.....	51
2.9.2 Abordagem Lagrangeana	55
2.10 ASCENSÃO DA PLUMA	57
2.11 DESCRIÇÃO DO WRF.....	58
2.12 DESCRIÇÃO DO CMAQ	59
3. MODELAGEM MATEMÁTICA.....	61
4. METODOLOGIA	73
4.1 DESENVOLVER A SOLUÇÃO TRIDIMENSIONAL SEMI-ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO.....	74
4.2 PROJETAR E CODIFICAR O MODELO MSRED	74
4.2.1 Projeto do Sistema de Modelagem.....	75
4.2.2 Camada de Persistência de Dados	77
4.2.3 A Camada de Apresentação	78
4.2.4 A Camada de Negócio.....	79
4.2.4.1 A Estrutura do Código.....	81
4.2.4.2 A Entrada de Dados Meteorológicos.....	83
4.2.4.3 O Núcleo do Modelo.....	84
4.2.4.3.1 Cálculo da Estabilidade Atmosférica	84

4.2.4.3.2	Cálculo do Coeficiente de Decaimento Físico-Químico	84
4.2.4.3.3	Cálculo da Velocidade de Deposição Seca	85
4.2.4.3.4	Cálculo do Coeficiente de Remoção por Chuva	87
4.2.4.3.5	A Estratégia Computacional para Processamento em Paralelo	88
4.2.4.4	As Saídas do Modelo.....	90
4.3	MELHORAR A REPRESENTAÇÃO DA NUVEM DE EXAUSTÃO DE FOGUETE	91
4.3.1	A Ascensão da Nuvem de Exaustão.....	91
4.3.1.1	Ascensão da Nuvem Instantânea (<i>cloud rise</i>)	92
4.3.1.2	Ascensão da Pluma Contínua (<i>plume rise</i>).....	96
4.3.2	Dimensões da Nuvem (Termo Fonte)	97
4.3.3	Distribuição de Material.....	97
4.3.4	Distribuição Espacial da Nuvem	99
4.4	INCORPORAR NOVAS PARAMETRIZAÇÕES DE TURBULÊNCIA ATMOSFÉRICA ..	99
4.5	INTEGRAR O MSRED COM O CMAQ PARA O TRANSPORTE QUÍMICO DE LONGO ALCANCE.....	102
5.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	104
5.1	PRIMEIROS ESFORÇOS – MODELAGEM COM WRF, SMOKE e CMAQ	104
5.2	MODELAGEM COM WRF-LES.....	104
5.3	MODELAGEM COM O MSRED	111
5.3.1	Análise da Convergência Numérica.....	112
5.3.2	Análise dos Coeficientes de Turbulência Atmosférica	116
5.3.3	Análise dos Resultados da Modelagem.....	119
5.3.4	Desempenho do Paralelismo	164
6.	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	168
7.	REFERÊNCIAS	172

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Ilustração das partes “ground-cloud” e “contrail-cloud” da emissão do foguete Titan IV associado com lançamento normal (Nyman, 2009).	25
Figura 2: Ilustração conceitual da formação da nuvem (fonte), “cloud-rise” e dispersão atmosférica da nuvem (Nyman, 2009).	26
Figura 3: Particionamento da nuvem estabilizada em discos (Nyman, 2009).	26
Figura 4: Fenômeno da pluma capturado pelo PlumeTracker (Wells et al., 2013).	31
Figura 5: Localização do Centro de Lançamento de Foguetes em Alcântara - MA.	45
Figura 6: O perfil do vento no CLA em 02/04/2010 (Nascimento et al., 2014). O primeiro quadro (acima) se refere à velocidade do vento, e o segundo (abaixo) se refere à direção do vento.	46
Figura 7: O padrão sinótico para a América do Sul no dia 02/04/2010 (Nascimento et al., 2014).	46
Figura 8: Estrutura da troposfera, evidenciando a localização da camada limite planetária e da atmosfera livre (adaptado de Stull, 1988).	48
Figura 9: O ciclo diário de evolução da CLP (adaptado de Stull, 1988). As marcações S1 a S6 correspondem a diferentes perfis de temperatura potencial (vide Figura 10).	49
Figura 10: Perfis de temperatura potencial na CLP ao longo de um dia (a posição das situações S1 a S6 estão definidas na Figura 9). AL é atmosfera livre, CC é camada de mistura ou convectiva, CR é camada residual e CE é camada estável noturna (Boçon, 1998).	50
Figura 11: Esquema ilustrando o processo de ascensão da pluma, onde h_e e x_f são, respectivamente, a altura efetiva e a distância percorrida pela pluma após a sua estabilização (Assael e Kakosimos, 2010).	58
Figura 12: Esquema da CLP dividida em um sistema de multicamadas.	63
Figura 13: Fluxograma ilustrando a cadeia de execução do sistema de modelagem.	76
Figura 14: Localização e distribuição dos domínios configurados na modelagem com WRF-LES. Cada domínio é representado por um retângulo, sendo o domínio 1 o mais externo, o domínio 0 imediatamente interno, e assim por diante.	105
Figura 15: Cenários de campos de ventos de superfície para os domínios 3 e 5, sendo o menor referente ao domínio 5.	105
Figura 16: Campos de vento simulados para 19 de Março de 2013 às 16:00h (à esquerda), e 20 de Março de 2013 às 11:00h (à direita), para o domínio 5 (Nascimento et al., 2015a).	106
Figura 17: Cenário de direção e velocidade do vento para a região do CLA, para os dias 20 e 21 de março de 2013, respectivamente, gerado pelo WRF-LES (Nascimento et al., 2015b).	107
Figura 18: Cenário de temperatura do ar a 2m na região do CLA para os dias 20 e 21 de março de 2013, respectivamente, gerado pelo WRF-LES (Nascimento et al., 2015b). ..	107
Figura 19: Comportamento do parâmetro velocidade do vento em diferentes alturas, comparando os resultados do modelo WRF-LES com os dados de radiossondagem coletados no CLA (Nascimento et al., 2015b).	108

Figura 20: Comparação do comportamento de dados de modelagem WRF-LES com dados de radiossondagem para o parâmetro direção do vento (Nascimento et al., 2015b).	109
Figura 21: Comparação do comportamento de dados de modelagem WRF-LES com dados de radiossondagem para o parâmetro temperatura do ar (Nascimento et al., 2015b).	109
Figura 22: Convergência da solução estacionária da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(x,z)/Q$ referente à superfície em função do número de pontos de quadratura M_2 para diferentes distâncias com $\Delta z = 10\text{m}$	114
Figura 23: Convergência da solução bidimensional estacionária da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(x,z)/Q$ referente à superfície em função do número de pontos de quadratura M_2 para diferentes distâncias com $\Delta z = 50\text{m}$	114
Figura 24: Convergência da solução dependente do tempo da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(t,x,z)/Q$ referente à superfície, em função do número de pontos de quadratura M_1 para diferentes distâncias com $M_2 = 2$, $\Delta z = 10\text{m}$ e $t = 600\text{s}$	115
Figura 25: Convergência da solução bidimensional dependente do tempo da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(t,x,z)/Q$ referente à superfície em função do número de pontos de quadratura M_1 para diferentes distâncias com $M_2 = 2$, $\Delta z = 50\text{m}$ e $t = 600\text{s}$	115
Figura 26: Convergência da solução tridimensional dependente do tempo da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(t,x,y,z)/Q$ referente à superfície em função do número de autovalores com $k = 2$, $m = 2$, $\Delta z = 50\text{m}$ e $t = 600\text{s}$	116
Figura 27: Perfil vertical dos coeficientes de turbulência K_x , K_y e K_z para atmosfera instável.	117
Figura 28: Perfil vertical dos coeficientes de turbulência K_x , K_y e K_z para atmosfera estável.	117
Figura 29: Perfil vertical dos coeficientes de turbulência K_x , K_y e K_z para atmosfera neutra.	117
Figura 30: Volume percentual de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para o caso de lançamento normal, e para as condições atmosféricas estável, instável e neutra, respectivamente.	123
Figura 31: Volume percentual de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para o caso de lançamento abortado, e para as condições atmosféricas estável, instável e neutra, respectivamente.	124
Figura 32: Ilustração do processo de discretização da nuvem de exaustão, em que cada partição é tratada como um disco cilíndrico, sinalizando a porção do volume da partição que se sobressai ao volume da porção equivalente da esfera.	124
Figura 33: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição instável.	125
Figura 34: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento normal e condição instável.	126
Figura 35: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição instável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.	130
Figura 36: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição instável, usando como condição inicial o cenário de concentração do final da hora (cenário de concentração instantânea de 60min) modelado pelo MSRED.	132
Figura 37: Cenário de concentração média de 1h do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição instável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.	134

Figura 38: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição estável.	134
Figura 39: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento normal e condição estável.	136
Figura 40: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição estável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.....	139
Figura 41: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição neutra.	141
Figura 42: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento normal e condição neutra.	142
Figura 43: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição neutra, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.....	145
Figura 44: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento abortado e condição instável.	146
Figura 45: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento abortado e condição instável.	147
Figura 46: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento abortado, condição instável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.....	150
Figura 47: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento abortado e condição estável.	152
Figura 48: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento abortado e condição estável.	153
Figura 49: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento abortado, condição estável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.	157
Figura 50: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento abortado e condição neutra.	158
Figura 51: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento abortado e condição neutra.	160
Figura 52: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento abortado, condição neutra, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.	163
Figura 53: Desempenho do paralelismo implementado no MSRED medido pelo tempo de processamento (em segundos) do cálculo da concentração devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão em função da quantidade de processadores.	165
Figura 54: <i>Speedup</i> do paralelismo implementado no MSRED medido pelo tempo de processamento (em segundos) do cálculo da concentração devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão em função da quantidade de processadores.	166

Figura 55: Eficiência do paralelismo implementado no MSRED medido pelo tempo de processamento (em segundos) do cálculo da concentração devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão em função da quantidade de processadores. 166

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Relação das configurações do MSRED, na ordem em que são apresentadas no arquivo de entrada.....	78
Tabela 2: Listagem dos arquivos de entrada e saída, juntamente com suas respectivas variáveis de ambiente. ...	79
Tabela 3: Relação da taxa de emissão e calor efetivo do propelente para cada tipo de lançamento para o VLS. .	80
Tabela 4: Composição básica dos constituintes presentes na combustão do propelente no 1º, 2º e 3º estágio do VLS (Moreira et al., 2010a).	80
Tabela 5: Pseudocódigo do modelo MSRED.	81
Tabela 6: Relação dos parâmetros meteorológicos requeridos pelo modelo MSRED.	83
Tabela 7: Relação entre o comprimento de Monin-Obukhov e a estabilidade atmosférica.	84
Tabela 8: Pseudocódigo do cálculo da concentração $C(t,p,n,x,y,z)$	88
Tabela 9: Avaliação estatística com base em valores de referência para os parâmetros meteorológicos temperatura do ar, direção e velocidade do vento, produzidos pelo modelo WRF-LES (Nascimento et al., 2015b).	110
Tabela 10: Informações meteorológicas de cada cenário de modelagem.	112
Tabela 11: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen (Gryning, 1987).	113
Tabela 12: Relação das camadas verticais e suas características, derivadas da simulação com WRF-LES e utilizadas na modelagem com o MSRED e o CMAQ.	119
Tabela 13: Relação das informações referentes à formação da nuvem de exaustão de poluentes, para cada condição atmosférica e tipo de lançamento.	121
Tabela 14: Informações sobre a altura(m) de cada partição e o volume percentual de cada uma em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para o caso de lançamento normal e para cada condição de estabilidade atmosférica, para todas as camadas que a nuvem intercepta.	121
Tabela 15: Informações sobre a altura (m) de cada partição e o volume percentual de cada uma em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para o caso de lançamento abortado e para cada condição de estabilidade atmosférica, para todas as camadas que a nuvem intercepta.	122
Tabela 16: Efeitos na saúde humana causados pela exposição ao gás HCl (Baxter et al., 2003).	125
Tabela 17: Tempo de processamento da concentração devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão para cada conjunto de processadores.	167

LISTA DE SÍMBOLOS

C, c	Concentração média
K	Coeficiente de difusão turbulenta;
K_x, K_y, K_z	Componentes Cartesianos do coeficiente de difusão turbulenta
u	Componente na direção x do vetor vento
v	Componente na direção y do vetor vento
w	Componente na direção z do vetor vento
S	Termo fonte
$\overline{u'c'}$	Fluxo turbulento de poluente na direção longitudinal
$\overline{v'c'}$	Fluxo turbulento de poluente na direção lateral
$\overline{w'c'}$	Fluxo turbulento de poluente na direção vertical
v_g	Velocidade de deposição gravitacional
λ	Coeficiente de reação química de primeira ordem
A	Coeficiente de remoção devido a precipitação
Q	Taxa de emissão do poluente
H_s	Altura da fonte
η	Função de Heaviside
t_r	Tempo de liberação do poluente
h	Altura da camada limite atmosférica
V_d	Velocidade de deposição seca
u_v	Vetor tridimensional do vento
∇	Operador de gradiente;
D	Coeficiente de difusão molecular
\vec{r}	Posição da partícula
\vec{v}	Vetor velocidade do segmento
\vec{v}_t	Vetor de flutuação turbulenta
a	Termo determinístico, que representa a força de fricção exercida pelo fluxo sobre a partícula
σ_w	Flutuação da velocidade turbulenta vertical
dW	Processo incremental de Wiener

T_L	Escala de tempo de integração Lagrangeana
L_y	Posição distante da fonte na direção y
N	Número de subcamadas
$\psi_i(y)$	Autovetor associado ao problema de Sturm-Liouville
λ_i	Autovalor associado ao problema de Sturm-Liouville
M_1	Número de pontos de quadratura Gaussiana aplicada à variável t
M_2	Número de pontos de quadratura Gaussiana aplicada à variável x
P_e	Número de Peclet
a_j, a_k, p_j, p_k	Pesos e raízes do esquema da quadratura Gaussiana, para os pontos de quadratura j e k
L	Comprimento de Monin-Obukhov
$t_{1/2}$	Tempo de meia-vida do composto químico
r_a	Resistência aerodinâmica
r_b	Resistência aerodinâmica
r_c	Resistência de superfície
z_s	Altura de referência
z_o	Comprimento de rugosidade do solo
κ	Constante de Von Karman
ψ_c	Parâmetro de correção de estabilidade
S_c	Número de Schmidt
ν	Viscosidade cinemática do ar
S_t	Número de Stokes
R	Taxa de precipitação pluviométrica
t^*	Tempo de estabilização da nuvem de exaustão
s	Parâmetro de estabilidade atmosférica
T	Temperatura do ar ambiente

T_v	Temperatura virtual do ar ambiente
q_v	Razão de mistura de vapor d'água
θ	Temperatura virtual potencial
g	Aceleração da gravidade
c_p	Calor específico do ar a pressão constante
σ	taxa de lapso adiabático seco
$\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$	Coeficientes de entranhamento longitudinal, transversal e vertical, respectivamente
F_i	Termo de empuxo térmico para a nuvem instantânea
H	Calor efetivo contido no combustível
ρ	Densidade do ar (g/m^3)
z_i	Altura de estabilização da nuvem instantânea (caso de lançamento normal)
t_s	Tempo para o foguete alcançar a altura de estabilização
F_c	Termo de empuxo térmico para a pluma contínua
z_c	Altura de estabilização da pluma contínua (caso de lançamento abortado)
r_x, r_y, r_z	Raios longitudinal, transversal e vertical da nuvem no tempo de estabilização
r_e	Raio de cada partição da nuvem, para o caso de lançamento normal
r_c	Raio de cada partição da nuvem, para o caso de lançamento abortado
V_c	Volume de cada partição da nuvem
V_e	Volume total da nuvem esférica (caso de lançamento normal)
V_{ic}	Volume total da nuvem cilíndrica (caso de lançamento abortado)
h_{ic}	Altura total da nuvem cilíndrica (caso de lançamento abortado)
x_k	Posição longitudinal final de cada partição da nuvem, após sua estabilização
w^*	Escala de velocidade convectiva
u^*	Velocidade de fricção

f_c	Parâmetro de Coriolis
u_{v10}, u_{d10}	Velocidade e direção do vento médio a nível de superfície (10 m)
z_{ce}	Altura do centro da camada meteorológica
z_{ct}	Altura do topo da camada meteorológica
r_n	Raio de estabilização de cada partição da nuvem de exaustão
h_{nEN}	Altura de cada partição da nuvem em condição atmosférica estável (lançamento normal)
h_{nEA}	Altura de cada partição da nuvem em condição atmosférica estável (lançamento abortado)
h_{nIN}	Altura de cada partição da nuvem em condição atmosférica instável (lançamento normal)
h_{nIA}	Altura de cada partição da nuvem em condição atmosférica instável (lançamento abortado)
h_{nNN}	Altura de cada partição da nuvem em condição atmosférica neutra (lançamento normal)
h_{nNA}	Altura de cada partição da nuvem em condição atmosférica neutra (lançamento abortado)
V_{nEN}	Percentual do volume de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão em condição atmosférica estável (lançamento normal)
V_{nEA}	Percentual do volume de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão em condição atmosférica estável (lançamento abortado)
V_{nIN}	Percentual do volume de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão em condição atmosférica instável (lançamento normal)
V_{nIA}	Percentual do volume de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão em condição atmosférica instável (lançamento abortado)
V_{nNN}	Percentual do volume de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão em condição atmosférica neutra (lançamento normal)
V_{nNA}	Percentual do volume de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão em condição atmosférica neutra (lançamento abortado)
n_p	Número de processadores
$S_p(n_p)$	Medida do <i>speedup</i> do paralelismo do código do modelo
$T_e(n_p)$	Tempo de execução do modelo para n_p processadores
$E_p(n_p)$	Medida da eficiência do paralelismo do código do modelo

1. INTRODUÇÃO

Durante um lançamento de foguete, devido ao empuxo produzido pela queima de combustível sólido ou líquido, gases (tóxicos ou não) são liberados na atmosfera e que são posteriormente dispersos pelos ventos. Nos principais campos de lançamento de foguetes e veículos espaciais do mundo (tal como o *Kennedy Space Center* nos Estados Unidos da América - EUA ou no *Centre Spatial Guianense* na Guiana Francesa), algoritmos matemáticos são executados para analisar, antes de um lançamento, a trajetória potencial destes gases. As condições meteorológicas (principalmente os ventos e a turbulência atmosférica associada) são as principais forçantes desta dispersão. Esses campos de lançamento são estruturas especialmente preparadas para o lançamento de veículos espaciais, como foguetes e ônibus espaciais. Não obstante a existência de quase 200 países no mundo, existem apenas um seleto grupo de 11 (onze) países que detém a tecnologia própria para lançamento de foguetes. Neste seleto grupo, quatro países são integrantes do Conselho de Segurança da ONU: EUA, Rússia, França e China. Os outros sete países são o Japão, o Brasil, a Índia, a Coreia do Sul, e a Agência Espacial Europeia – ESA, que congrega os interesses dos países da Alemanha, Áustria, Bélgica, Dinamarca, Espanha, Finlândia, França, Grécia, Países Baixos, Irlanda, Itália, Luxemburgo, Noruega, Portugal, Reino Unido, Suécia e Suíça. A ESA tem ainda acordos de estreita colaboração com o Canadá, Hungria e República Checa. Ainda, dois outros países podem ser acrescentados a este seleto grupo: o Irã e a Coreia do Norte, embora estes tenham um programa espacial com uma conotação mais militar do que os citados anteriormente. Como exemplos de centros de lançamento podem-se citar o Centro de Lançamento de Alcântara e o Centro de Lançamento da Barreira do Inferno, ambos no Brasil, sob a jurisdição do Comando da Aeronáutica; o Cabo Canaveral, sob a jurisdição da NASA (*National Aeronautics and Space Administration*; Administração Nacional do Espaço e da Aeronáutica), que é uma agência do governo dos EUA; o Centro de Lançamento de Kourou, na Guiana Francesa, sob a jurisdição da França; o Cosmódromo de Plesetsk, sob a jurisdição da Rússia; e o Centro de Satish Dhawan, na Índia (Dellagnezze, 2014).

Tais modelos computacionais são uma abstração de um processo que envolve uma ou mais funções projetadas para simplificar a descrição de um determinado processo natural, e podem ser limitados por fatores como os limites da solução e aproximação matemática, escopo e disponibilidade de dados, e a complexidade inerente ao processo de análise e de redução de dados que pode ser tolerada. Diversos trabalhos, como em Denison et al. (1994), Brady et al. (1997), Bennett et al. (1997), Bernhardt et al. (2011), Koch et al. (2013), Voigt et

al. (2013) e Bauer et al. (2013), tratam do impacto que os poluentes de exaustão de foguetes causam na estratosfera, sem dar foco ao impacto que causam na região da camada limite atmosférica, notadamente no momento do lançamento do foguete e em seguida a este. De fato, isso se deve ao grande apelo que há na avaliação do impacto que estes poluentes causam na camada de ozônio, já que uma grande quantidade de HCl e alumina é emitida durante a queima do propelente. Partículas de alumina podem prover uma superfície para conversão heterogênea de HCl em outros compostos clorados, que por sua vez desempenham importante papel na depleção da camada de ozônio (Pitts e Finlayson-Pitts, 2000).

Especificamente, contudo, este trabalho está focado na modelagem conceitual, matemática e computacional da dispersão e do transporte de efluentes derivados de nuvens de exaustão de foguetes na atmosfera, na região da baixa troposfera, a fim de prover uma descrição viável deste fenômeno, que é caracterizado pela difusão turbulenta na atmosfera. Algumas abordagens, como será melhor explicitado na sessão “*Revisão Bibliográfica*”, utilizam técnicas de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD, para a sigla em inglês) para modelagem da formação da pluma de exaustão, contudo esta é uma metodologia que possui custo computacional muito alto e que impede sua utilização em ambiente operacional. Outras utilizam uma abordagem baseada em modelos Lagrangeanos para a modelagem dos gases tóxicos, enquanto outras utilizam abordagens Gaussianas. Notadamente, pode-se citar os modelos REEDM (Bjorklund et al., 1982), RTVSM (Bjorklund, 1990), OBODM (Bjorklund et al., 1998), SARRIM (Cencetti et al., 2011), PlumeTracker (Wells et al., 2013) e MSDEF (Moreira et al., 2011).

Embora cada abordagem possua suas vantagens em representar a física envolvida nesse processo, existe a necessidade de se avançar tecnologicamente na construção de uma ferramenta computacional híbrida, capaz de incorporar o estado da arte na modelagem meteorológica e do transporte e dispersão de poluentes de exaustão de foguetes na atmosfera. Neste sentido, nos principais centros de lançamento do mundo, vêm sendo desenvolvidas e utilizadas abordagens híbridas, que incorporam várias ferramentas para simulação e avaliação do impacto de lançamento de foguetes na atmosfera. Estas envolvem a modelagem meteorológica, seguida da modelagem da formação da nuvem de gases tóxicos no momento do lançamento do foguete e de sua posterior dispersão e transporte durante e após sua estabilização, para avaliação de curto alcance numa escala de tempo relativamente pequena (de minutos a algumas poucas horas), consecutivamente associada com a modelagem do transporte químico da nuvem de gases tóxicos para avaliação de longo alcance e em escalas

de tempo maiores na baixa troposfera. Tais abordagens híbridas são mais completas e adequadas para determinação do impacto dos efluentes tóxicos de exaustão de foguetes, e serão apresentadas com mais detalhes na sessão “*Revisão Bibliográfica*”.

Buscando dar este passo além, este trabalho apresenta um esforço na construção de um modelo de curto alcance que avance na solução tridimensional da equação de difusão-advecção, na representação da nuvem formada durante o lançamento de foguetes através da consideração do tempo de liberação dos poluentes de exaustão utilizando uma solução analítica não estacionária, na preparação e simulação do campo de concentração de poluentes para modelagem de longo alcance, no estudo e simulação da meteorologia, da dispersão e transporte químico dos poluentes de exaustão de foguetes na região do Centro de Lançamento de Alcântara, e no acoplamento dessas soluções visando à criação de um sistema híbrido para a avaliação operacional do impacto na atmosfera de lançamentos normais e de casos de acidentes devido a explosões de foguetes.

Infelizmente, não há ainda no Brasil um modelo totalmente pronto para este uso visando atender às demandas de avaliação do impacto na qualidade do ar em eventos de lançamento de foguetes, quer seja no Centro de Lançamento de Alcântara (CLA) ou no Centro de Lançamento da Barreira do Inferno (CLBI). Sendo assim, justifica-se a importância de se investigar e desenvolver um sistema integrado de modelagem computacional que permita fazer estas avaliações antes dos lançamentos dos foguetes. É importante mencionar que a área espacial está inserida como área estratégica dentro da Estratégia Nacional de Defesa (END), documento gerado pelo Governo Brasileiro (Agência Espacial Brasileira, 2013).

Assim posto, o objetivo geral desse trabalho é criar um novo modelo computacional denominado *MSRED (Model for Simulating the Rocket Exhaust Dispersion)* capaz de simular a dispersão de curto alcance de nuvens de exaustão de foguetes, e de se integrar com o modelo fotoquímico CMAQ (*Community Multiscale Air Quality*) para simulação do transporte químico de longo alcance, visando à avaliação do impacto na qualidade do ar das emissões de foguetes, a ser aplicado em lançamentos de foguetes considerando o Veículo Lançador de Satélites (desenvolvido pelo Brasil através do Instituto de Aeronáutica e Espaço – IAE) movido a propelente sólido e/ou do CICLONE 4 (em desenvolvimento pela Alcântara Cyclone Space, uma *joint venture* entre o Brasil e a Ucrânia), movido por propelentes líquidos. Com isso, este trabalho busca ampliar o conhecimento científico na área de modelagem computacional atmosférica, criando uma nova tecnologia nacional.

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- I. Desenvolver a solução tridimensional semi-analítica da equação de difusão-advecção;
- II. Projetar e codificar o modelo MSRED;
- III. Melhorar a representação do termo fonte (nuvem de solo e de arrasto), para melhorar as estimativas e reduzir os erros no modelo;
- IV. Incorporar novas parametrizações de turbulência atmosférica;
- V. Integrar o MSRED com o CMAQ para modelagem do transporte químico de longo alcance, através da geração das condições iniciais para o CMAQ com base na modelagem de curto alcance previamente realizada pelo MSRED, aplicando o modelo para a região do CLA.

Com o intuito de atingir os objetivos supracitados, este trabalho divide-se em seis capítulos. O Capítulo 1 introduz o assunto referente à modelagem da qualidade do ar da dispersão de efluentes de foguetes, com foco no Centro de Lançamento de Alcântara, Brasil. No Capítulo 2 é feita a revisão da literatura concernente ao assunto deste trabalho, levantando o atual estado da ciência nesta área de pesquisa. O Capítulo 3 traz em destaque a modelagem matemática aplicada no novo modelo. O Capítulo 4 apresenta a metodologia utilizada para alcançar os objetivos estabelecidos. O Capítulo 5 é destinado à apresentação e discussão dos resultados produzidos neste trabalho. No Capítulo 6 são apresentadas as conclusões e recomendações para trabalhos futuros. E por fim, o Capítulo 7 destina-se à apresentação das referências bibliográficas.

2. REVISÃO DA LITERATURA

Nos EUA, extensivas campanhas de medidas meteorológicas e de concentração de gases foram realizadas para avaliar o desempenho de modelos que buscam simular a dispersão de efluentes de foguetes na atmosfera (Stephens e Stewart, 1977). Estimativas para lançamentos normais para todas as situações meteorológicas também foram feitas (Dumbauld, 1970, 1971; Dumbauld e Bjorklund, 1971), em particular, analisando os componentes do propelente e a sua concentração. A NASA possui códigos computacionais que são designados para calcular concentrações de pico, dosagem e deposição (resultante da queda por gravidade e por chuva) a partir de lançamentos normais e abortados para usar em atividades de planejamento de lançamentos e avaliação ambiental, estimativas de pré-lançamentos dos efeitos ambientais e análise ambiental de pós-lançamentos (Dumbauld et al., 1973; Bjorklund et al., 1982). Muitos destes modelos são baseados nos conceitos de dispersão Gaussiana. Nesta revisão bibliográfica pode-se citar os modelos REEDM (Bjorklund et al., 1982), RTVSM (Bjorklund, 1990), OBODM (Bjorklund et al., 1998), SARRIM (Cencetti et al., 2011), PlumeTracker (Wells et al., 2013) e MSDEF (Moreira et al., 2011). O modelo computacional utilizado pela NASA é o modelo REEDM (*“Rocket Exhaust Effluent Diffusion Model”*). O modelo REEDM tem sido usado para avaliar o impacto ambiental de operação do *“Space Shuttle”* (ônibus espacial) e é usado operacionalmente no Cabo Canaveral para simular o comportamento da pluma e para avaliar a potencial ameaça à saúde dos gases tóxicos presentes nas nuvens liberadas pelos foguetes. Já o modelo SARRIM é utilizado pelo *Service Environnement et Sauvegarde Sol* no *Centre National d'Études Spatiales* (CNES), na avaliação do impacto ambiental das emissões de efluentes de foguetes no portal espacial de Kourou, Guiana Francesa.

Foguetes, de uma forma geral, são as únicas fontes antropogênicas que diretamente emitem poluentes na atmosfera superior (acima da troposfera), tais como CO, Al₂O₃ e compostos clorados, podendo impactar na camada de ozônio, na distribuição de aerossóis na atmosfera, e na composição da ionosfera (Bernhardt et al. 2011; Voigt et al., 2013). Apesar da importância desse assunto, o foco deste trabalho será na formação e dispersão da nuvem de poluentes de exaustão na baixa troposfera; não será foco deste projeto a análise do impacto dessas emissões na atmosfera superior.

Os conceitos de *“ground-cloud”* and *“contrail-cloud”* são ilustrados na Figura 1 usando o lançamento do Titan IV, no Cabo Canaveral, como exemplo. Para análise de dispersão

atmosférica da emissão de foguetes que podem afetar receptores sobre o solo, tem sido prática padrão nos centros de lançamento dos EUA (“Cape Canaveral” e “Vandenberg Air Force Base”) simular emissões do lançamento de um veículo a partir do solo até aproximadamente 3.000 m. Para qualquer aplicação de modelagem e simulação de lançamentos normais e abortados na avaliação da qualidade do ar, é imprescindível a correta representação da formação das nuvens de exaustão de foguetes.

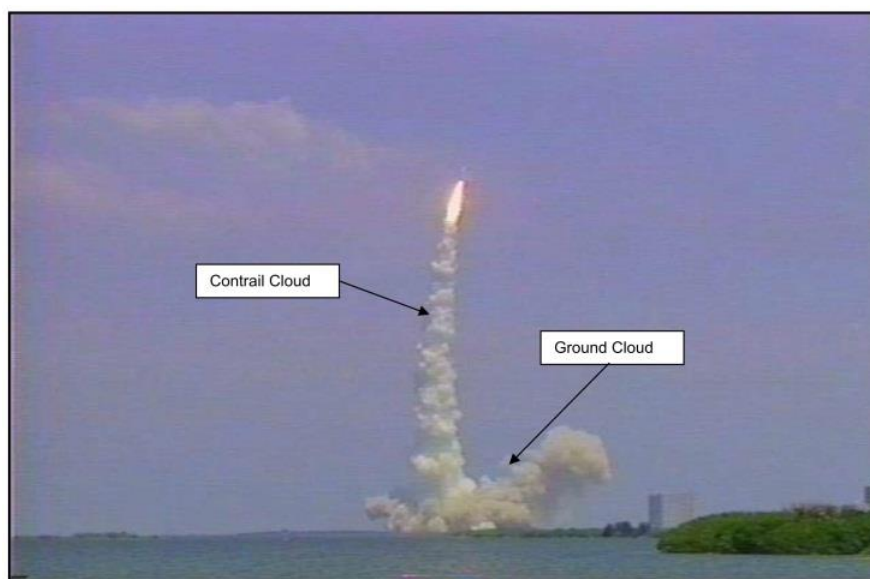


Figura 1: Ilustração das partes “ground-cloud” e “contrail-cloud” da emissão do foguete Titan IV associado com lançamento normal (Nyman, 2009).

2.1 O MODELO REEDM

A ferramenta para análise da dispersão tóxica nos EUA e, para suporte de lançamentos e avaliação de risco público, é o modelo REEDM (“*Rocket Exhaust Effluent Diffusion Model*”) (Bjorklund et al., 1982, 1998; Bjorklund, 1990). Uma hipótese que o modelo REEDM faz, sobre a natureza e o comportamento da nuvem liberada pelo foguete, é que ela pode ser inicialmente definida como uma única nuvem que cresce e se move, mas permanece como uma única nuvem durante a formação da fase de ascensão da mesma. Este conceito é ilustrado na Figura 2, e pode ser notado que o modelo REEDM é planejado para obter concentrações na direção do vento preferencial a partir da posição na nuvem estabilizada.

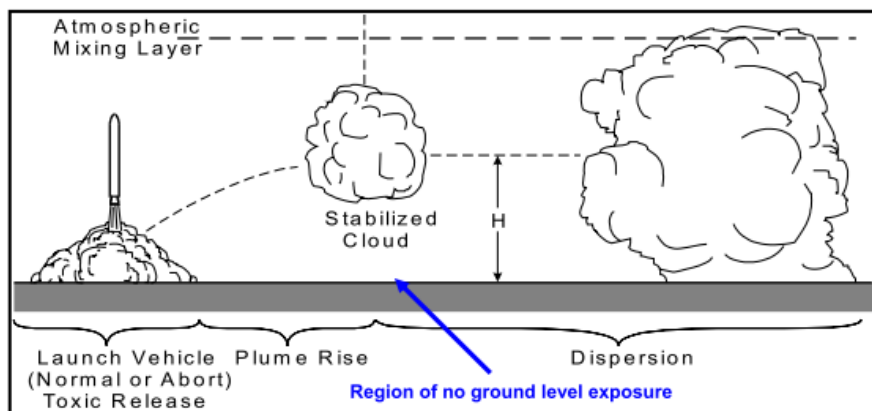


Figura 2: Ilustração conceitual da formação da nuvem (fonte), “cloud-rise” e dispersão atmosférica da nuvem (Nyman, 2009).

O aspecto “multicamada” do modelo REEDM ainda é usado e se relaciona com o particionamento da nuvem estabilizada em “discos” de material da nuvem representados por diferentes níveis meteorológicos em várias altitudes. As espessuras típicas dos níveis são de 20 a 50 m de espessura. O modelo relaciona a formação inicial da nuvem na forma esférica para lançamentos normais e na forma cilíndrica para lançamentos abortados/testes/explosões. Uma vez que a nuvem está definida e atingiu a condição de estabilidade térmica com a atmosfera, a nuvem é particionada em “discos”. O posicionamento de cada disco com relação à origem (plataforma de lançamento) é determinado baseado no tempo de ascensão da nuvem através de uma sequência de camadas meteorológicas que são definidas usando um perfil vertical de medidas obtidas através de uma radiossonda. Cada camada meteorológica pode ter uma única velocidade e direção de vento que desloca o disco da nuvem. O conceito de partição da nuvem estabilizada é ilustrado na Figura 3.

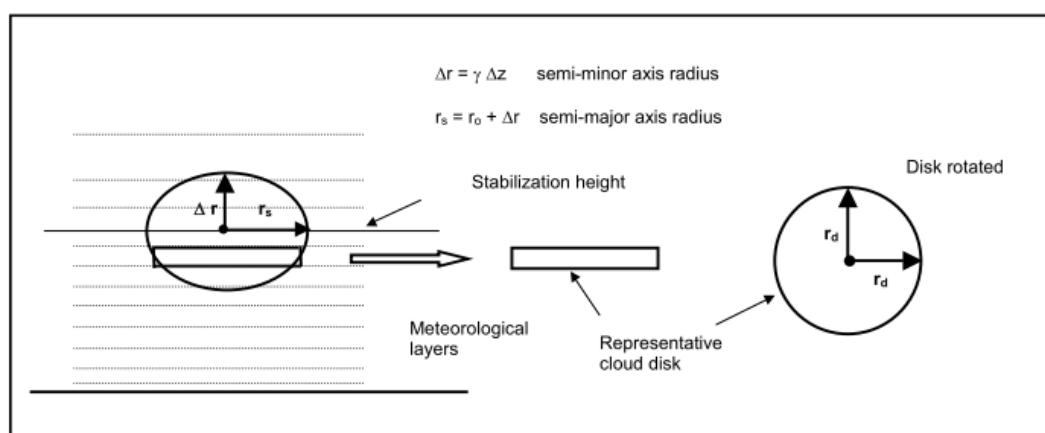


Figura 3: Particionamento da nuvem estabilizada em discos (Nyman, 2009).

A hipótese de transporte em linha reta usada no modelo REEDM durante o movimento da nuvem e fase de dispersão ignora a possibilidade de campos de vento complexos que

podem surgir em terrenos montanhosos ou que possam evoluir durante a passagem de uma brisa do mar ou frente de maior escala. Desta forma, é recomendado que a hipótese de ventos uniformes seja limitada ao transporte da pluma em distâncias inferiores a 25 km. Neste sentido, o modelo REEDM faz previsão de concentração que vai de 5 a 10 km a partir da plataforma de lançamento, de forma que esta hipótese não é um problema.

O modelo REEDM assume que todas as reações químicas de combustão são completadas antes do processo de ascensão da nuvem. Uma fração de massa é atribuída a cada constituinte e a massa total da fonte (nuvem) é multiplicada por esta fração para determinar a massa total de cada componente químico na nuvem. O peso molecular de cada espécie é usado para converter a concentração de massa por unidade de volume (mg/m^3) para parte por milhão (ppm).

O modelo REEDM faz previsões de concentração instantânea e média no tempo (intervalo de tempo típico de 10 min), sendo que em muitas situações é feita uma média de 1h para computar as concentrações médias. Um tempo médio mais curto é apropriado para exposição à nuvem do foguete, pois a fonte (nuvem) tipicamente passa sobre um receptor com uma escala de tempo de algumas dezenas de minutos antes que horas.

Vários estudos foram realizados para validação do modelo REEDM, nos chamados *Model Validation Programs* (MVP), como em Abernathy e Foster (2000). Eckman (2000) apresenta resultados de uma das avaliações feitas do modelo REEDM em eventos de lançamento de foguetes em Cabo Canaveral, EUA. Foi apontado que o modelo REEDM não representa muito bem casos com maior turbulência atmosférica, já que ele utiliza um esquema único de turbulência para simular a dispersão na região do centro de lançamento e seu entorno. De acordo com Nappo e Essa (2001), apesar do fato deste modelo ter sido utilizado operacionalmente por um longo tempo (desde a década de 80), ele pode não ter sido plenamente verificado utilizando dados de campo coletados nos centros de lançamento americanos, demonstrando que uma abordagem com modelo “*puff*” poderia levar a melhores resultados, principalmente no que tange aos parâmetros de dispersão. Este fato levou o REEDM a subestimar os resultados possivelmente devido a valores de coeficiente de dispersão mais elevados e ao conceito de atmosfera estacionária com turbulência homogênea, o que certamente não ocorre na região costeira de Cabo Canaveral. Anderson e McCaleb (2004) apresentam um estudo em que se conclui que o modelo REEDM apresenta deficiências para casos de lançamentos abortados devido a explosões, comparando os resultados com o modelo CALPUFF, que obteve melhores respostas neste tipo de situação.

Apesar dessas debilidades, o modelo REEDM ainda utilizado na NASA/KSC operacionalmente. Como exemplo, Bardina e Rajkumar (2003) desenvolveram um sistema baseado na Web que oferece um ambiente de simulação, comunicação, controle e comando inteligente em tempo real de atividades de lançamento e faixa de operação de veículos lançadores a partir da superfície. Chamado de “*Intelligent Launch and Range Operations Virtual Test Bed*” (ILRO-VTB), ele utiliza tecnologias modernas para comunicação de dados, serviço Web, e de modelagem e avaliação de resultados em conjunto com uma interface que possibilita a interação com o usuário. Seu intuito é aprimorar o estado da arte através da incorporação de diferentes ferramentas de simulação tradicionalmente autônomas em um único ambiente integrado. Ele incorpora o modelo REEDM em conjunto com o modelo CALPUFF para simulação da dispersão de gases tóxicos. Bardina e Thirumalainambi (2004, 2005) apresentam mais detalhes desta aplicação com alguns resultados e sugestões para trabalhos futuros. Outro exemplo está no trabalho de Arnold et al. (2005), que utilizou o modelo REEDM como simulador da dispersão de gases tóxicos para desenvolver um sistema de informações geográficas de previsão e visualização de perigo em áreas de lançamento da NASA, denominado “*Meteorological And Range Safety Support*” (MARSS).

É importante frisar que esse modelo não está disponível à comunidade científica para utilização e avaliação de seu desempenho e acurácia, impossibilitando a sua aplicação neste estudo.

2.2 O MODELO OBODM

O “*Open Burn/Open Detonation Dispersion Model*” ou OBODM (Bjorklund et al., 1998) é um modelo projetado para a avaliação de potenciais impactos na qualidade do ar provocados por queima a céu aberto ou detonação de munições obsoletas, propelentes de foguetes, e perdas industriais nas instalações do Departamento de Defesa e do Departamento de Energia dos EUA. OBODM simula o transporte e dispersão de poluentes utilizando algoritmos de ascensão e dispersão de nuvens de gases baseados em modelos de dispersão existentes. Ele é um modelo estritamente de transporte e dispersão, e não contém nenhum pré-processador para calcular as quantidades totais de poluentes liberados por detonação ou queima. Ao invés, ele é projetado para utilizar fatores de emissão empíricos ou derivados de um modelo de combustão. O modelo calcula concentrações de pico, média e dosagem de eventos de explosão/detonação e queima, considerando dois tipos de fontes: volume e linear. A grande maioria dos eventos de detonação ou queima pode ser modelada utilizando fontes

volume, enquanto que fontes lineares (que na verdade são representadas internamente pelo modelo como uma série de fontes volume) são pouco utilizadas e estão disponíveis para modelagem de casos específicos, como a liberação de poeira a partir de detonações realizadas em operações de mineração na superfície.

No OBODM, uma detonação é uma fonte instantânea, ou seja, cuja duração do evento é de no máximo 15s, liberando um “*puff*” ou “*nuvem*” como resultado do processo. Já para um evento de queima, com duração maior que 15s, uma fonte contínua é utilizada para representar a fonte, liberando uma “*pluma*”. O OBODM utiliza um conjunto de equações derivado do modelo REEDM para cálculo da ascensão da nuvem/pluma, da deposição gravitacional e seca e dos coeficientes de dispersão, acrescentando algumas melhorias a esses cálculos, como a penetração total ou parcial da nuvem ou pluma de poluentes na camada acima do topo da camada limite atmosférica, que foram incorporadas nas versões mais novas do modelo REEDM (Assael e Kakosimos, 2010). Esse modelo, embora esteja disponível para utilização, não é um modelo totalmente voltado para a modelagem da dispersão de gases tóxicos provenientes de nuvens de exaustão de foguetes, e, portanto, não poderia ser utilizado na região do CLA para a avaliação do impacto de lançamento de foguetes.

2.3 O MODELO SARRIM

Cencetti et al. (2011) apresenta o SARRIM (“*Stratified Atmosphere Rocket Release Impact Model*”), que é o sistema de modelagem atualmente utilizado pelo CNES na avaliação do impacto na qualidade do ar e no ambiente em eventos de lançamentos normais e abortados de foguetes na troposfera. Ele tem a prerrogativa de ser um sistema computacional capaz de ser executado de forma rápida, utilizando computadores comuns. Ele pode ser utilizado em atividades de planejamento de missões, avaliação do impacto ambiental, previsões pré-lançamento dos efeitos na atmosfera da operação de lançamento, tomada de decisão para posicionamento de rede de monitoramento ambiental, análise ambiental pós-lançamento e da acurácia do modelo.

O algoritmo do SARRIM pode ser resumido em 3 passos:

1. Cômputo da nuvem de poluentes até sua estabilização. O primeiro passo é o mais importante, pois qualquer modelo dessa natureza precisa prever adequadamente a altura e o tamanho da nuvem de exaustão após estabilização;

2. Cômputo das concentrações de gases (HCl, CO, NO_x), de partículas (alumina), de dosagem e de deposição para distâncias de curto alcance utilizando um modelo “*puff*” baseado na condição inicial de lançamento e na nuvem após ter atingido sua estabilização;
3. Cômputo das concentrações de gases (HCl, CO, NO_x), de partículas (alumina), de dosagem e de deposição para distâncias de longo alcance utilizando soma de função de Erf.

Ele ainda possui um módulo visualizador de resultados, capaz de realizar plotagens em duas e três dimensões. Seus resultados apontam que:

- A altura de estabilização da nuvem simulada está geralmente coerente com a altura medida;
- Para distâncias longas (acima de 20 km): as concentrações calculadas, bem como doses e deposição, estão com valores corretos em termos da localização, considerando algumas dificuldades em se conseguir medições precisas;
- Para distâncias curtas (até 20 km): os valores de concentração, dose e deposição estão superestimados. Estudos estão em andamento a fim de melhorar o desempenho do modelo para estes casos.

Assim como o REEDM, este modelo não está disponível para ser utilizado pela comunidade científica.

2.4 O MODELO PLUMETRACKER

Recentemente, Wells et al. (2013) apresentou um modelo, chamado PlumeTracker, que busca simular a elevação, o transporte, a estabilização e a posterior deposição e precipitação de partículas provenientes da nuvem de solo gerada pelo lançamento de foguetes. Para este fim, ele assume a pluma como sendo estática, sem a influência de reações químicas.

Para geração das condições iniciais do modelo, a formação da nuvem de solo é previamente simulada através de técnicas de CFD até alcançar a altura de 6.000 pés acima do nível do mar (cerca de 1.800 m), altura a partir da qual o modelo PlumeTracker de fato inicia seu processo de simulação. Em seguida, a partir da pluma previamente calculada, o modelo simula o transporte e elevação da pluma utilizando dados meteorológicos de direção e velocidade do vento variando com a altura, que podem ser oriundos tanto de dados

observacionais (como radiossondagem) quanto de simulações de modelos numéricos de previsão (como os modelos WRF ou RAMS). A partir de então, o PlumeTracker simula o transporte da pluma, determinando sua trajetória e elevação até chegar a uma condição de estabilidade a uma determinada altura. A partir desse ponto, a pluma sofre basicamente o transporte devido à ação do vento, havendo eventual formação de gotas de precipitação de acordo com o teor de saturação de umidade dentro da pluma.

Deste modo, o foco do PlumeTracker é basicamente modelar o processo de movimento da pluma a partir de 6.000 pés acima do nível do mar, de elevação e estabilização da nuvem até a precipitação de material particulado, sem se preocupar com a formação da nuvem a partir do lançamento de foguete, a modelagem da concentração dos poluentes gasosos e das reações químicas envolvidas, sendo portanto não adequado totalmente para a modelagem da dispersão dos gases tóxicos de foguetes, o que é o foco deste trabalho. A Figura 4 mostra os principais processos envolvidos no PlumeTracker.

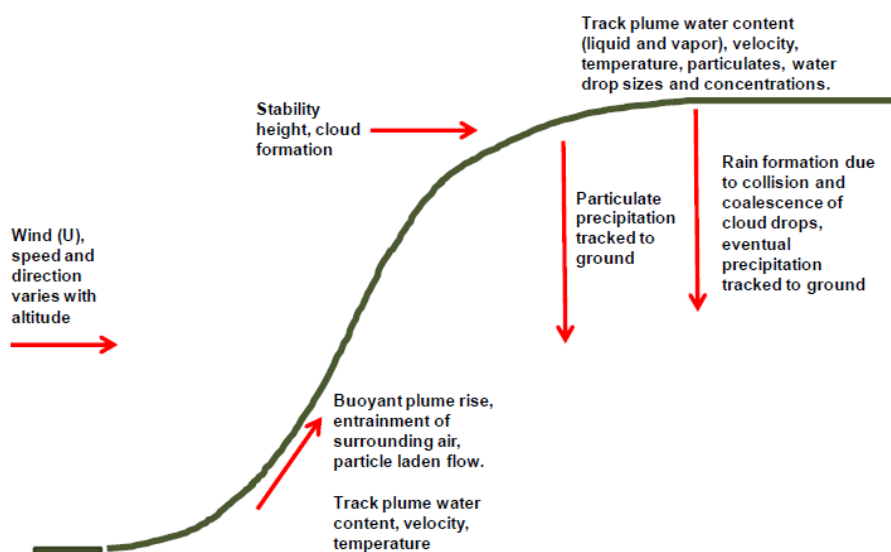


Figura 4: Fenômeno da pluma capturado pelo PlumeTracker (Wells et al., 2013).

2.5 O MODELO MSDEF

Desenvolvido por Moreira et al. (2011) para utilização pelo IAE no Centro de Lançamento de Alcântara, o MSDEF (Modelo Simulador da Dispersão de Efluentes de Foguetes) foi projetado para calcular concentrações de pico (máximas), com deposição seca e úmida (resultante de ação da gravidade e remoção por precipitação devido à chuva), incluindo reações químicas de primeira ordem, para lançamentos normais e abortados/testes/explosão para uso em:

- planejamento de atividades de missões e avaliação ambiental;
- previsões pré-lançamentos dos efeitos ambientais de operações de lançamento;
- análise ambiental pós-lançamento.

O modelo MSDEF utiliza os mesmos aspectos físicos usados no modelo REEDM, porém com diferenças nas camadas meteorológicas, com a condição de continuidade de fluxo e concentração (perfis verticais mais reais), diferentes parametrizações da turbulência (coeficientes de difusão e parâmetros de dispersão), considerando o atual conhecimento da física da camada limite atmosférica. Cabe ressaltar que os parâmetros de escala fundamentais, tais como a altura da camada limite atmosférica, a velocidade convectiva, a velocidade de atrito, perfis verticais do vento, comprimento de Monin-Obukhov e demais parâmetros importantes na determinação destas escalas de comprimento e velocidade, podem ser obtidos a partir de dados de radiossondagem ou de um modelo de mesoescala.

O programa é controlado pelo operador com dados de entrada introduzidos através de uma interface. Uma vez que o operador tenha escolhido as opções de lançamento, o programa automaticamente seleciona um conjunto de dados para uso nos algoritmos desenvolvidos para calcular os seguintes parâmetros:

- parâmetros micrometeorológicos (altura da camada limite atmosférica, velocidade convectiva, velocidade de atrito, comprimento de Monin-Obukhov) e de turbulência (coeficiente de difusão e parâmetro de dispersão lateral);
- posição no espaço da “*ground-cloud*” ascendente e tempo de estabilização da nuvem;
- dimensões da nuvem como uma função da altura;
- distribuição dos produtos efluentes dentro da nuvem como uma função da altura;

Após o programa executar os cálculos de concentração, o resultado é visualizado através de uma interface gráfica, com resolução em x (direção longitudinal e do vento médio u) e y (direção transversal) escolhidos previamente pelo operador. De acordo com a seleção do intervalo de tempo de concentração (10 ou 60 min), o arquivo de saída incluirá a concentração de pico instantânea e o valor médio para este intervalo, com as respectivas distâncias onde ocorrem estes máximos, incluindo a direção preferencial do vento, sendo todos os resultados de concentração obtidos pelo modelo ao nível do solo. Como mencionado anteriormente, o operador tem a possibilidade da visualização gráfica, com gráficos da

concentração instantânea e média (10 ou 60 min) em função da distância x e também do campo de isolinhas. Além disso, no arquivo de saída (relatório.dat) são mostrados todos os parâmetros micrometeorológicos, parâmetros do gás ou partícula (deposição, remoção) e do foguete utilizados na simulação. Também, é importante salientar que este código permite a inclusão de nuvens e a introdução da topografia da região.

Como o novo modelo é uma evolução do MSDEF, a descrição matemática e a estratégia para solução da equação de difusão advecção utilizada no MSDEF será apresentada na seção a seguir.

2.5.1 Descrição Matemática do MSDEF

A equação de difusão-advecção pode ser escrita na seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S \quad (1)$$

onde C representa a concentração média, K_x, K_y, K_z e u, v, w são as componentes Cartesianas do coeficiente de difusão e da velocidade do vento, respectivamente, e S é o termo fonte. Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam os fluxos turbulentos de poluentes na direção longitudinal, lateral e vertical, respectivamente.

O modelo matemático mais utilizado preocupa-se em solucionar o problema de fechamento da equação (1) baseando-se na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a difusão molecular, assume que a turbulência é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média:

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial C}{\partial x} ; \overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial C}{\partial y} ; \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2)$$

Neste sentido, considerando-se um sistema Cartesiano de coordenadas em que a direção x coincide com a do vento médio, a equação de difusão-advecção transiente pode ser escrita como (Blackadar, 1997):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S \quad (3)$$

A integração lateral (direção y) da equação (3) conduz à seguinte equação:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + w \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) + S \quad (4)$$

onde,

$$\bar{C} = \int_{L_y} C(x, y, z, t) dy \quad (5)$$

é a concentração integrada lateralmente. Esta hipótese é aceitável, pois a dispersão lateral pode ser assumida Gaussiana, a qual resultará na seguinte equação:

$$C(x, y, z, t) = \bar{C}(x, z, t) \frac{e^{(-y^2 / 2\sigma_y^2)}}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \quad (6)$$

O modelo para simulação da dispersão de foguetes deve levar em conta as seguintes situações: deposição seca e úmida e reações químicas de primeira ordem. Para isto, a equação resultante a ser resolvida é:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - v_g \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) - \lambda \bar{C} - \Lambda \bar{C} \quad (7)$$

onde v_g é a velocidade de queda das partículas devido à gravidade, λ representa reações químicas de primeira ordem (decaimento) e Λ representa o coeficiente de remoção devido a precipitação. Para a solução da equação (7), é preciso considerar as condições iniciais e de contorno. Assume-se, portanto, que inicialmente a região de dispersão não está poluída, ou seja:

$$\bar{C}(x, z, 0) = 0 \quad \text{em } t = 0 \quad (8)$$

e no ponto $(0, H_s, t)$ existe uma fonte contínua com taxa de emissão constante Q :

$$\bar{C}(0, z, t) = \frac{Q}{u} [\eta(t) - \eta(t - t_r)] \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \quad (9)$$

onde $\delta(z - H_s)$ é a função delta de Dirac, H_s é a altura da fonte, η é a função de Heaviside e t_r é o tempo de liberação (Bianconi e Tamponi, 1993). Assumem-se condições de contorno de fluxo nulo de poluentes no topo da camada limite atmosférica:

$$K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = h \quad (10)$$

e uma condição não nula na superfície:

$$K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = V_d \bar{C} \quad \text{em } z = 0 \quad (11)$$

onde h é a altura da camada limite atmosférica e $V_d (m/s)$ é a velocidade de deposição seca.

2.5.2 Solução Analítica Utilizando a Transformada de Laplace

A transformada de Laplace é uma técnica bem conhecida para resolver equações diferenciais lineares e uma literatura vasta é encontrada sobre este assunto. Esta metodologia é aplicada para resolver a equação (7) de modo a construir soluções analíticas para a equação de difusão-advecção e que permitirá realizar simulações numéricas da dispersão de poluentes liberado por foguetes na camada limite atmosférica. Para atingir este objetivo, a equação (7) é transformada em um conjunto de equações diferenciais ordinárias pela aplicação da transformada de Laplace. Após resolver estas equações com procedimento padrão, a concentração de poluentes é obtida realizando-se a inversão da concentração transformada pelo esquema numérico de quadratura Gaussiana. Existe vasta literatura sobre este método de solução (Moreira et al., 1999, 2005a, 2006). Aqui será mostrado o método para uma equação simplificada e, após, a solução mais completa, que é a utilizada no modelo.

2.5.3 Equação Unidimensional Transiente

A solução analítica da equação de difusão unidimensional dependente do tempo, sem vento (fonte área), pode ser escrita na seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{C}_n}{\partial t} = K_z \frac{\partial^2 \bar{C}_n}{\partial z^2} \quad (12)$$

Na altura $(H_s, 0)$ assume-se uma fonte contínua com taxa de emissão constante Q (massa por unidade de área):

$$\bar{C}(z, 0) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{em } t = 0 \quad (13)$$

Aplicando-se a transformada de Laplace na equação (12), na variável t , obtém-se:

$$\frac{d^2}{dz^2} \hat{C}_n(z, s) - \frac{s}{K_n} \hat{C}_n(z, s) = -\frac{1}{K_n} \hat{C}_n(H_s, 0) \quad (14)$$

onde $\hat{C}_n(z, s) = L_p\{\bar{C}_n(z, t); t \rightarrow s\}$. A equação (14) é uma equação linear, de 2ª ordem não homogênea (solução do tipo $y = y_h + y_p$, onde y_h é a solução da parte homogênea e y_p da particular). A solução geral da equação (14) é:

$$\hat{C}_n(z, s) = A_n e^{-R_n z} + B_n e^{R_n z} + \frac{Q}{2R_n} (e^{-R_n(z-H_s)} - e^{R_n(z-H_s)}) \quad (15)$$

onde,

$$R_n = \pm \sqrt{\frac{s}{K_n}} \quad \text{e} \quad R_a = \pm \sqrt{K_n s}$$

sendo a solução da parte homogênea: $\hat{C}_h = A_n e^{-R_n z} + B_n e^{R_n z}$

e a solução particular (SP): $\hat{C}_p = \frac{Q}{2R_a} \left(e^{-R_n(z-H_s)} - e^{R_n(z-H_s)} \right)$

A concentração é obtida invertendo-se numericamente a concentração transformada \hat{C} pelo esquema de quadratura Gaussiana, sendo substituída a variável complexa s pelos valores dos pontos da quadratura. Desta forma, podemos escrever:

$$\bar{C}_n(z, t) = \sum_{i=1}^k a_i \frac{p_i}{t} \hat{C}_n \left(z, \frac{p_i}{t} \right) \quad (16)$$

Portanto, a solução é dada pela equação:

$$\begin{aligned} \bar{C}_n(z, t) = \sum_{i=1}^k a_i \frac{p_i}{t} & \left[A_n e^{-\left(\sqrt{\frac{p_i}{tK_n}}\right)z} + B_n e^{\left(\sqrt{\frac{p_i}{tK_n}}\right)z} + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} \frac{Q}{\sqrt{\frac{p_i K_n}{t}}} \left(e^{-\left(z-H_s\right)\left(\sqrt{\frac{p_i}{tK_n}}\right)} - e^{\left(z-H_s\right)\left(\sqrt{\frac{p_i}{tK_n}}\right)} \right) H(z-H_s) \right] \end{aligned} \quad (17)$$

onde $H(z - H_s)$ é a função de Heaviside e k é o número de pontos da quadratura Gaussiana. Finalmente, aplicando-se as condições de contorno e interface nas soluções, surge um sistema linear para as constantes de integração (coeficientes A_n e B_n). Então, a concentração é obtida invertendo-se numericamente a concentração transformada \hat{C} pelo esquema de quadratura Gaussiana. Assim, tem-se o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned}
 \text{em } z = 0 & \rightarrow K_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_1(s, 0) = 0 \\
 \text{em } z = z_1 & \rightarrow \bar{C}_1(s, z_1) = \bar{C}_2(s, z_1) \\
 & K_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_1(s, z_1) = K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_2(s, z_1) \\
 \text{em } z = z_2 & \rightarrow \bar{C}_2(s, z_2) = \bar{C}_3(s, z_2) \\
 & K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_2(s, z_2) = K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_3(s, z_2) \\
 & \vdots \\
 \text{em } z = z_{N-1} & \rightarrow \bar{C}_{N-1}(s, z_{N-1}) = \bar{C}_N(s, z_{N-1}) \\
 & K_{z_{N-1}} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_{N-1}(s, z_{N-1}) = K_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_N(s, z_{N-1}) \\
 \text{em } z = z_i & \rightarrow K_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_N(s, z_i) = 0
 \end{aligned} \tag{18}$$

Matriz resultante:

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} & M_{45} & M_{46} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & M_{53} & M_{54} & M_{55} & M_{56} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{n-1,n-3} & M_{n-1,n-2} & M_{n-1,n-1} & M_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{n,n-1} & M_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ \vdots \\ \vdots \\ A_{n-1} \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ SP'_{n'} \\ SP'_{n'} \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{19}$$

onde $SP_{n'}$ é a derivada da solução particular na região de emissão e $SP'_{n'}$ é a sua derivada.

2.5.4 A Solução da Equação do Modelo MSDEF

A equação (17) é mais geral que todas as equações solucionadas anteriormente por esta metodologia. Porém, pode-se aplicar o mesmo método obtendo-se a seguinte solução final:

para $t > t_r$:

$$\begin{aligned} \bar{C}_n(x, z, t) = & \sum_{i=1}^k a_i \left(\frac{p_i}{t} \right) \sum_{j=1}^m a_j \left(\frac{p_j}{x} \right) \left[A_n e^{-G_n z} + B_n e^{G_n z} + \right. \\ & \left. + Q \frac{(1 - e^{-p_i \frac{t_r}{t}})}{F_n} (e^{-(z-H_s)G_n} - e^{(z-H_s)G_n}) H(z - H_s) \right] \end{aligned} \quad (20)$$

para $t_r > t$:

$$\begin{aligned} \bar{C}_n(x, z, t) = & \sum_{i=1}^k a_i \left(\frac{p_i}{t} \right) \sum_{j=1}^m a_j \left(\frac{p_j}{x} \right) \left[A_n e^{-G_n z} + B_n e^{G_n z} + \right. \\ & \left. + \frac{Q}{F_n} (e^{-(z-H_s)G_n} - e^{(z-H_s)G_n}) H(z - H_s) \right] \end{aligned} \quad (21)$$

onde:

$$G_n = -\frac{v_g}{2K_z} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{v_g}{K_z} \right)^2 + \frac{4}{K_z} \left[\frac{p_i}{t} + \lambda + \Lambda + \frac{p_j}{x} u_n \left(1 - \frac{p_j}{P_e} \right) \right]};$$

$$F_n = 2 \frac{p_i}{t} \frac{\sqrt{K_z \left[\frac{p_i}{t} + \lambda + \Lambda + \frac{p_j}{x} u_n \left(1 - \frac{p_j}{P_e} \right) \right]}}{\left(1 - \frac{p_j}{P_e} \right)}$$

e $P_e = u_n x / K_x$ é o número de Peclet, que representa a relação entre a advecção e a difusão. Isto pode ser interpretado fisicamente como o parâmetro que indica a magnitude das condições atmosféricas em termos da intensidade dos ventos.

É importante salientar que as soluções obtidas são válidas para $x > 0$ e/ou $t > 0$. Isto se deve ao fato de que o esquema de inversão por quadratura Gaussiana não funciona para $x = 0$ e/ou $t = 0$. As constantes a_i , a_j e P_i , P_j são os pesos e as raízes do esquema de quadratura Gaussiana e são tabulados em Stroud e Secrest (1966) e k , m são os pontos da quadratura. É importante mencionar que este procedimento conduz à solução para a concentração com uma dependência contínua em z devido à imposição da condição de continuidade de concentração e fluxo na interface z_n .

Portanto, após a determinação da altura de estabilização e da fonte (várias fontes devido ao particionamento da nuvem), a concentração final será a contribuição de todas as fontes, ou seja,

$$C(x, y, z, t) = \sum_i^n C_i(x, y, z, t) \text{ onde } i = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (22)$$

onde n representa a n -ésima fonte devido ao particionamento da nuvem de poluentes liberados pelo foguete na altura de estabilização.

2.6 OUTRAS FERRAMENTAS DE MODELAGEM DE NUVENS DE EXAUSTÃO DE FOGUETES

Outras tentativas de modelar casos de lançamentos de foguetes foram construídas, seja com abordagens híbridas, seja com novas abordagens. Evans (2000) conduziu um trabalho junto à NASA para avaliação da dispersão da nuvem de poluentes devido à explosão do foguete Delta II, logo após sua decolagem, e validando, para este caso, os modelos de dispersão REEDM em conjunto com o modelo de transporte HYPACT (*HYbrid PArticle and Concentration Transport*), e o modelo atmosférico RAMS (*Regional Atmospheric Modeling System*) para modelagem meteorológica.

Boyd et al. (2006) apresenta um conjunto de ferramentas que trabalham de forma integrada visando o suporte na avaliação da faixa de segurança de operações de lançamento de veículos em casos normais e de acidente, na *Air Force's 45th Weather Squadron* (45 WS) para a *Eastern Range* (ER) e o *Kennedy Space Center* (KSC), nos EUA. Para isso, ele utiliza dados meteorológicos de uma rede de monitoramento adequadamente projetada para entrada nos modelos de gases tóxicos, que por sua vez permitem a avaliação dos impactos de lançamentos normais e abortados. Ele também possui um módulo para previsão de raios na região de lançamento e para previsão de exposição de material radioativo e de suas consequências. No caso da modelagem de gases tóxicos, em particular, ele utiliza o modelo REEDM, e comenta que um novo modelo tridimensional baseado em “*puff*” chamado RD3D (*Range Dispersion Three-Dimensional*) estava em desenvolvimento pela ACTA, Inc., e estaria em fase de testes para posteriormente substituir o REEDM ainda em 2006. Contudo, até o presente momento, não há menção na literatura, nem nos órgãos da NASA/KSC ou 45 WS, sobre tal substituição.

Rajasekhar et al. (2011) apresenta um trabalho realizado no Centro Espacial de Satish Dawan, na Índia. Durante 103s, 207 toneladas de propelente sólido foram queimadas, gerando uma nuvem de poluentes de exaustão cuja composição se refere majoritariamente a alumina, HCl e CO. O modelo HYSPLIT (*Hybrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory*) foi utilizado para simular e prever a dispersão dos poluentes e suas concentrações em altitudes a nível do solo, 10, 100, 300 e 500 m. Para entrada de dados meteorológicos no modelo, foi configurado e executado o modelo PSU/NCAR *Mesoscale Model* (MM5), cujo resultado foi comparado com perfis de temperatura e de umidade relativa obtidos por radiossondagem, a fim de validar sua aderência à região. Embora o trabalho tenha a prerrogativa de ser um primeiro passo do Programa Espacial Indiano na modelagem do impacto dos gases de exaustão devido a lançamento de foguetes, nenhuma consideração foi levantada sobre a simulação da formação da nuvem de gases tóxicos, algo essencial para a modelagem deste tipo de evento. Também, o modelo meteorológico MM5, que é um modelo que foi utilizado largamente em todo mundo até o fim da década de 90 para previsão meteorológica, atualmente está descontinuado. Em seu lugar, o modelo *Weather Research and Forecasting* (WRF) (Skamarock e Klemp, 2008) – que será apresentado mais adiante – foi desenvolvido e hoje representa o estado da arte em modelagem e previsão meteorológica.

Iriart e Fisch (2016) utilizaram o modelo WRF acoplado ao seu módulo químico (CHEM) para simular a dispersão dos poluentes emitidos por um Veículo Lançador de

Satélites (VLS) lançado a partir do CLA, realizando simulações para diferentes condições meteorológicas no CLA para o ano de 2008, todas para o poluente CO, considerando que toda a emissão do foguete ocorre a nível de superfície, em um domínio com 1 km de resolução com 20 pontos de grade em cada direção. Schuch e Fisch (2017) desenvolveram um trabalho derivado de Iriart e Fisch (2016), utilizando o modelo WRF-CHEM, porém implementando um mecanismo de distribuição das emissões devido ao lançamento do foguete ao longo das camadas verticais, e avaliando o impacto para outros poluentes que não somente o CO, no caso o HCl, alumina e CO₂, porém sem considerar o impacto de longo alcance do transporte químico do HCl, visto ser esse o mais quimicamente reativo e o mais perigoso entre esses poluentes.

Koch et al. (2013) apresenta um estudo financiado pela Agência Espacial Europeia (ESA) para criação e aplicação de um sistema de simulação multidisciplinar em diferentes escalas espaciais e temporais, que envolve desde cálculos de combustão em motores de foguetes a simulações da pluma de poluentes em escalas regionais e globais. Sua estratégia inicia na modelagem via CFD das condições termodinâmicas e dos produtos químicos na saída da tubeira de cada tipo de foguete (Athena II, Vega, Soyuz e Ariane5). Com essas informações, o modelo inicia o cálculo da formação da pluma inicial, que logo é liberada da tubeira do foguete até o momento em que as interações químicas e mecânicas se reduzem consideravelmente, utilizando uma abordagem com CFD para modelagem da turbulência e das reações químicas, com malhas que variam de 700 a 1500 m na direção de saída dos efluentes, e 40 a 300 m de raio na direção transversa ao fluxo, para diferentes altitudes, como a 18,7, 30 e 42 km para o foguete Vega e a 30 km para o Soyuz. Em seguida, é calculada a formação da pluma intermediária através da modelagem da difusão de curto alcance com reações químicas, numa escala de tempo de 1h, baseado no trabalho de Denison et al. (1994), focado na modelagem da difusão e reações químicas da pluma de exaustão na estratosfera. Por último, ele utiliza o modelo SILAM (*System for Integrated Modeling of Atmospheric Composition*) para modelagem do transporte químico da pluma intermediária para verificar seu impacto na estratosfera. Neste trabalho o foco foi dado ao impacto das emissões de foguetes na estratosfera, de modo que, em nenhum caso, foi realizado um estudo para formação da pluma/nuvem de poluentes de exaustão a nível do solo, no momento do lançamento, para estudo do impacto dos efluentes de exaustão na baixa troposfera.

Bauer et al. (2013) apresenta um esforço no desenvolvimento de um modelo para descrever a propagação da pluma de exaustão de foguete após a saída da tubeira. Esse modelo

possui o objetivo de permitir uma rápida análise da estrutura da pluma e das espécies de exaustão dentro da pluma. As características da pluma dependem altamente das condições ambientais, que variam com a altitude. Cálculos via CFD tem sido executados para a modelagem da formação da pluma, como o trabalho anteriormente explicitado realizou, e estes resultados são utilizados neste trabalho para verificar a acurácia do modelo sendo desenvolvido. Como os esforços de Koch et al. (2013) se baseiam na modelagem via CFD da formação da pluma inicial e intermediária, que é um processo computacional caro do ponto de vista de tempo de processamento, esse esforço visa permitir uma rápida análise e verificação do impacto da pluma de exaustão de foguetes na estratosfera, em diferentes altitudes. Semelhantemente, esse modelo não tem por objetivo lidar com o impacto da nuvem de poluentes de exaustão de foguetes na camada limite atmosférica.

Essas abordagens híbridas, que envolvem a combinação de modelagem meteorológica com modelos de dispersão e transporte químico, são mais completas e adequadas para determinação do impacto dos efluentes tóxicos de exaustão de foguetes em escalas espaciais que variam de alguns poucos quilômetros (curto alcance, menor que 20 km) até dezenas de quilômetros (longo alcance, maior que 20 km), e escalas temporais que variam de minutos até horas. Contudo, as abordagens que foram levantadas carecem da utilização de ferramentas que representem o estado da arte.

Neste trabalho, portanto, será utilizado o modelo WRF para geração das informações meteorológicas para entrada no novo modelo MSRED que será desenvolvido para modelagem de curto alcance da dispersão dos gases tóxicos de lançamentos de foguetes, e o modelo CMAQ para modelagem do transporte químico para avaliação de longo alcance. Esse processo será detalhado no Capítulo 4.

2.7 A REGIÃO DO CENTRO DE LANÇAMENTO DE ALCÂNTARA

O Centro de Lançamento de Alcântara (CLA) está situado na cidade Alcântara, no litoral do estado do Maranhão, Brasil, conforme Figura 5 apresenta, tendo como coordenadas geográficas 2°24' S; 44°24' W, a 32 km da capital, São Luís, e com altitude entre 40 m e 50 m. Lá, são realizados os lançamentos de cargas úteis (satélites e/ou experimentos científicos) brasileiros, por meio do VLS e/ou foguetes de sondagem, tal como o VSB-30.



Figura 5: Localização do Centro de Lançamento de Foguetes em Alcântara - MA.

O CLA possui uma localização privilegiada para a construção de um centro de lançamentos de foguetes devido à proximidade com a linha do Equador (latitude de 2°S), faixa na qual o gasto de energia é bastante reduzido para colocação de satélites em órbita geoestacionária, possibilitando grande economia de combustível (Silva e Fisch, 2014). O CLA apresenta características típicas, pois possui uma região de rugosidade abrupta: superfície lisa próxima à superfície rugosa. Além disso, nesta descontinuidade, ocorre uma relativa variação topográfica (falésias do mar), com desnível em torno de 50m. Próxima a esta região de transição abrupta (litoral), encontra-se a rampa de lançamento de foguetes, a qual sofre fortemente a influência destes dois fatores. Esta rampa situa-se cerca de 50m da costa, em uma altitude de 42 m. Neste caso, os foguetes colocados na rampa sofrem a influência de forte turbulência, devido à influência do perfil de vento. O vento, inicialmente em equilíbrio com sua superfície oceânica, interage com a vegetação arbustiva (altura média das árvores de 3 m), modificando-se. Aumentando a complexidade desta situação, ocorre o deslocamento vertical da superfície, devido às falésias.

De acordo com Fisch (1999), o clima dessa região é complexo, devido à proximidade com a linha equatorial, sofrendo direta influência da mesma. Climatologicamente, devido à ação em grande escala da Zona de Convergência Intertropical (ZCIT), a região possui duas estações bem distintas: uma estação chuvosa e úmida de Janeiro a Junho, com maiores índices pluviométricos em Março e Abril (precipitação mensal em torno de 300 mm); e uma estação seca de Julho a Dezembro, com índices pluviométricos bem baixos (precipitação nula ou muito baixa, menor que 30 mm/mês). Os ventos também se comportam de maneira bem

distinta, de acordo com a estação vigente. Na estação seca, os ventos chegam a 8 m/s a 70 m de altura, e na estação chuvosa, 6 m/s. A fim de se entender o perfil vertical dos ventos na região do CLA, uma radiossonda foi lançada, utilizando o sistema Vaisala Oy (sonda RSV92G), que é o estado da arte em termos de medições de ar superior. A direção e velocidade dos ventos até a altura de 5.000 m foram medidas e são apresentadas na Figura 6, para um determinado dia do ano (02/04/2010), mostrando claramente o perfil vertical dos ventos na estação chuvosa: há um aumento linear da velocidade do vento da superfície até o valor máximo, de aproximadamente 16 m/s a 3.000 m, sendo predominantemente NE/E até os 500 m, e acima disso girando para o sul (100-110°), mostrando claramente o padrão sinótico devido à ação da ZCIT, levando à formação de um longo agrupamento de nuvens sobre o oceano e continente (Figura 7).

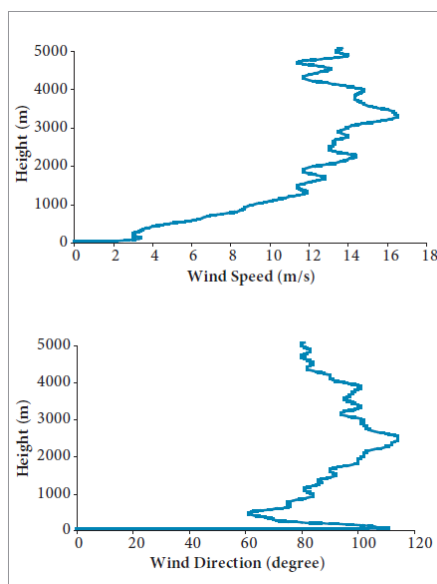


Figura 6: O perfil do vento no CLA em 02/04/2010 (Nascimento et al., 2014). O primeiro quadro (acima) se refere à velocidade do vento, e o segundo (abaixo) se refere à direção do vento.

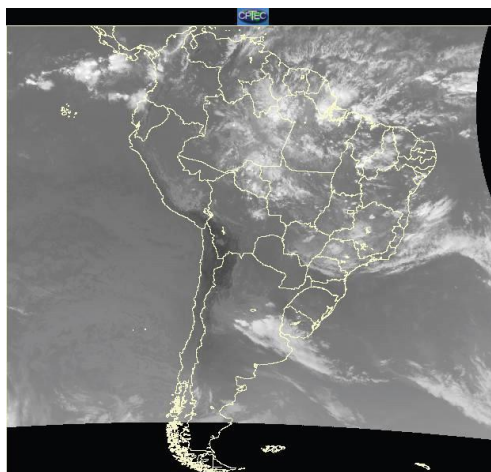


Figura 7: O padrão sinótico para a América do Sul no dia 02/04/2010 (Nascimento et al., 2014).

A região do CLA é circundada por algumas cidades na maior parte de pequeno porte, porém com um grande centro urbano localizado em sua proximidade. Nas direções norte, nordeste e leste, o CLA é rodeado pelo Oceano Atlântico. Já a sudeste/sul do CLA está localizada, a cerca de 30 km, a região metropolitana da cidade de São Luís, capital do estado do Maranhão. Esta região possui cerca de 1.300.000 (um milhão e trezentos mil) habitantes, sendo mais de 1.000.000 (um milhão) somente na cidade de São Luís (IBGE, 2010). Na direção sul do CLA, a pouco mais de 11 km, está localizada a cidade de Alcântara, com pouco mais de 21.000 (vinte e um mil) habitantes. A sudoeste estão as cidades de Lagoa do Mato, com quase 11.000 (onze mil) habitantes a 40 km de distância do CLA, Bequimão, com pouco mais de 20.000 (vinte mil) habitantes a 48 km, Peri Mirim, com cerca de 13.000 (treze mil) habitantes a 60 km, Palmeirândia, com quase 19.000 (dezenove mil) habitantes a 68 km, e São Bento, com cerca de 40.000 (quarenta mil) habitantes, distante 65 km do CLA. A noroeste se encontram as cidades de Guimarães, com cerca de 12.000 (doze mil) habitantes e distante 33 km, Central do Maranhão com quase 8.000 (oito mil) habitantes a 53 km, e Mirinzal com cerca de 14.000 (quatorze mil) habitantes e a cerca de 52 km. E a noroeste/norte, se encontra a cidade de Cedral, com pouco mais de 10.000 (dez mil) habitantes à distância de 39 km.

2.8 A CAMADA LIMITE ATMOSFÉRICA

A troposfera é a porção da atmosfera em que se encontra a vida terrestre. Ela se estende da superfície terrestre até cerca de 12 km de altura (15 a 17 km nos trópicos), podendo ser dividida em duas partes: a parte mais inferior, que possui contato com a superfície terrestre, denominada camada limite atmosférica ou camada limite planetária (CLP), e a parte mais superior, conhecida como atmosfera livre (AL), que se inicia no topo da CLP, estendendo-se até o topo da troposfera.

A AL é governada por processos que ocorrem em grande escala, tais como os gradientes de pressão horizontal, frentes frias, perturbações atmosféricas etc. Nesta porção da troposfera, o efeito Coriolis (que ocorre devido ao movimento de rotação da Terra) deve ser considerado, devido à escala de tempo e espaço dos fenômenos que nela ocorrem. Por outro lado, a CLP é influenciada principalmente por processos locais tais como a topografia, a variação da rugosidade do solo, do tipo de vegetação e cobertura do solo, dentre outros. É na CLP que as pessoas vivem, e, por conseguinte, é de crucial importância entender como se comportam os poluentes no que tange aos processos de transporte, difusão, advecção, deposição e interação química. Enquanto que na AL o fluxo é predominantemente laminar, na

CLP é de natureza turbulenta, cuja intensidade determinará a condição de estabilidade atmosférica. A Figura 8 apresenta a localização da CLP e da AL em relação à troposfera.

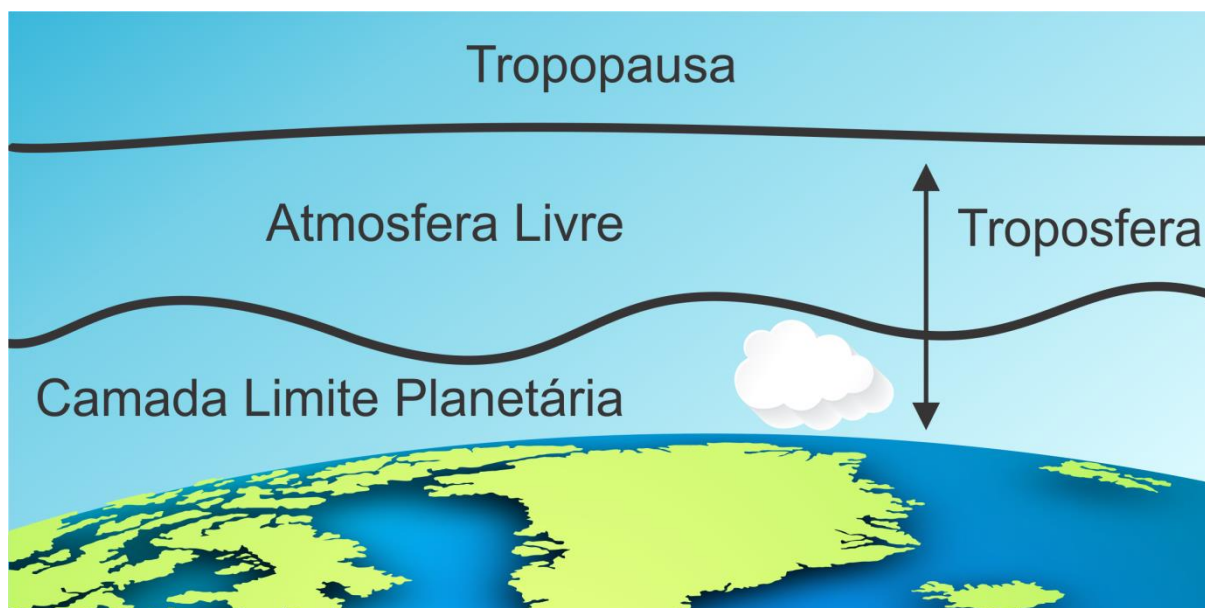


Figura 8: Estrutura da troposfera, evidenciando a localização da camada limite planetária e da atmosfera livre (adaptado de Stull, 1988).

A CLP, do ponto de vista meteorológico, desempenha um papel fundamental na determinação do clima local de uma região, conectando a superfície terrestre com a atmosfera livre. De acordo Stull (1988), ela é influenciada diretamente pelos processos que ocorrem na superfície terrestre, tais como a fricção gerada pelo arraste e cisalhamento do vento e o ciclo diário de aquecimento e resfriamento, respondendo a esses processos em uma escala de tempo que varia desde poucos minutos a várias horas (como no ciclo diário). As características e a evolução temporal da CLP são governadas pela turbulência atmosférica, que é de natureza caótica e em grande parte é gerada por forças que interagem com a superfície, gerando fluxos turbulentos que transportam matéria e energia através de turbilhões, que podem ocorrer desde uma escala milimétrica até uma escala de centenas de metros.

A Figura 9 mostra uma estrutura típica da CLP que se desenvolve ao longo de um dia. Segundo Stull (1988), as quatro componentes que mais se destacam nessa estrutura são a camada de superfície (CS), a camada de mistura ou convectiva (CC, predominante durante o dia), a camada residual (CR) e a camada estável (CE, predominante durante a noite). A Figura 10 mostra a variação dos perfis de temperatura potencial ao longo de um ciclo diário, correspondentes às horas do dia marcadas na Figura 9.

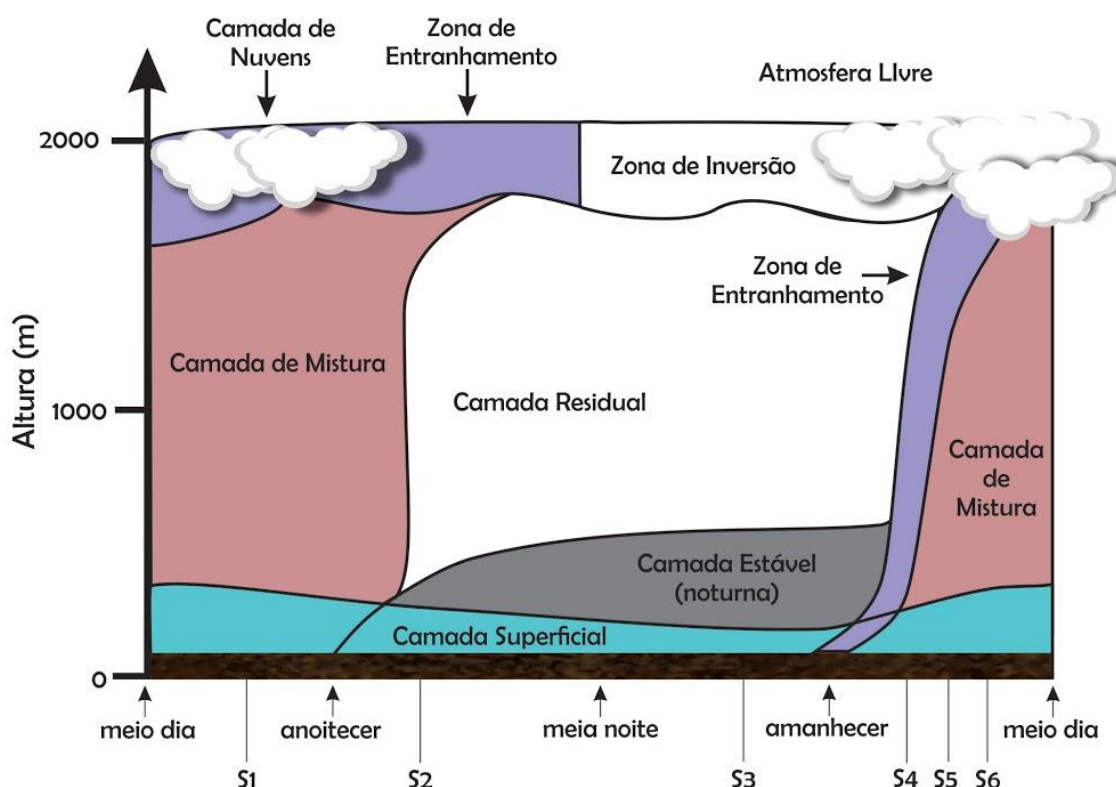


Figura 9: O ciclo diário de evolução da CLP (adaptado de Stull, 1988). As marcações S1 a S6 correspondem a diferentes perfis de temperatura potencial (vide Figura 10).

Quando amanhece, a superfície terrestre é aquecida pela radiação solar e sua temperatura cresce, atingindo seu máximo por volta das 12 às 14 horas. A camada de ar acima do solo se aquece também, pois recebe um fluxo de calor da superfície, resultando num gradiente vertical negativo de temperatura que resulta na destruição da camada estável noturna. Esta nova camada que vai se formando tem um nível alto de intensidade turbulenta, devido aos efeitos expressivos de cisalhamento e de empuxo térmico que ocorrem próximo ao solo, resultando daí sua natureza instável. Sua espessura aumenta durante todo o período matutino, conforme ocorre o aumento da temperatura do solo. Na medida em que a tarde avança, a temperatura do solo começa a diminuir, diminuindo também a altura desta camada turbulenta. Em tardes de vento, particularmente com nuvens espessas, a CLP é completamente turbulenta e sua altura é determinada pela velocidade do vento e a rugosidade da superfície.

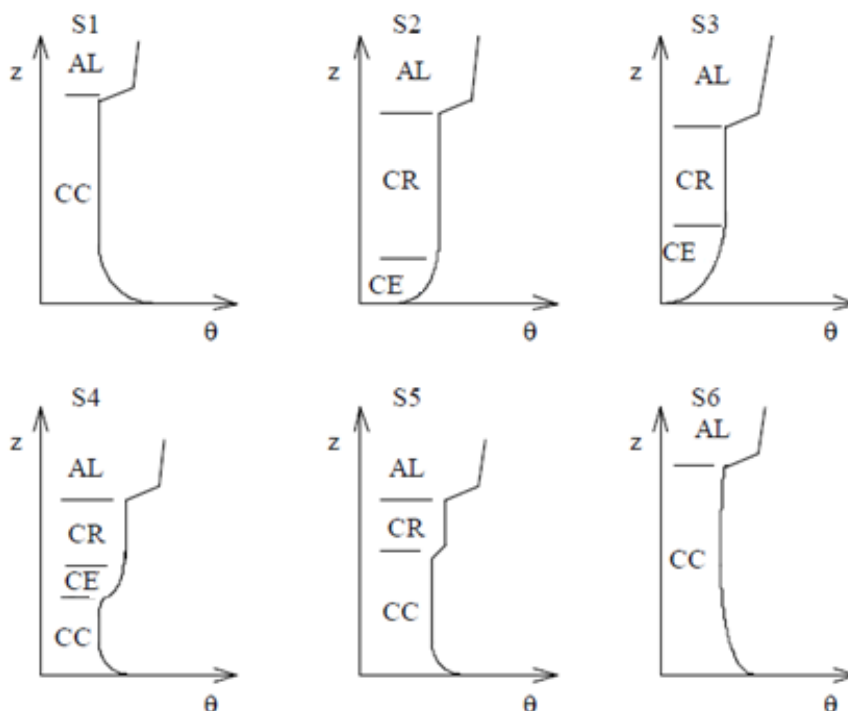


Figura 10: Perfis de temperatura potencial na CLP ao longo de um dia (a posição das situações S1 a S6 estão definidas na Figura 9). AL é atmosfera livre, CC é camada de mistura ou convectiva, CR é camada residual e CE é camada estável noturna (Boçon, 1998).

A influência do resfriamento do solo, que ocorre durante a noite por emissão de radiação infravermelha, causa a diminuição da espessura da camada de mistura. Assim, a espessura da camada turbulenta é muito menor que durante o dia. Com o solo mais frio, há um fluxo de calor da atmosfera para este, originando um gradiente vertical positivo de temperatura, ou seja, uma camada de ar estavelmente estratificada próxima do solo. Esta camada, que é denominada de camada estável, cresce durante toda a noite. Como consequência do resfriamento, as circulações convectivas (ou termas) cessam de se formar, provocando o referido decaimento da turbulência e a formação de uma camada residual acima da camada estável, cuja estrutura assemelha-se à da camada convectiva, porém em um estado de colapso, com diminuição da turbulência convectiva até a sua completa inatividade.

Durante todo o ciclo, uma camada mais fina se forma bem próximo à superfície, na parte mais baixa da CLP, cuja altura pode variar de 10 a 200m, conhecida como camada de superfície. Nesta camada, a interação entre a atmosfera e a superfície terrestre é fortemente sentida, predominando a turbulência mecânica, pois os fluxos verticais turbulentos, de calor e de cinética são negligenciados, variando menos que 10% em magnitude, sendo considerados constantes.

2.9 DESCRIÇÃO DO TRANSPORTE DE POLUENTES NA ATMOSFERA

A dispersão de poluentes na atmosfera é, em geral, descrita principalmente por duas abordagens matemáticas distintas: a Euleriana e a Lagrangeana. Na abordagem Euleriana, adotam-se um intervalo de tempo, uma seção ou um volume de controle no espaço e consideram-se todas as partículas que passem por esse local, de modo que as propriedades do escoamento seja função do espaço (pontos de observação) e do tempo, com base em um sistema de referência fixado em relação a um domínio espacial fixo. Já na Lagrangeana, o sistema se move junto com o movimento atmosférico, de modo que o movimento de cada partícula é descrito e sua trajetória total é mapeada em função do tempo. Cada uma dessas abordagens apresenta vantagens e desvantagens, que serão melhor descritas nas seções a seguir.

2.9.1 Abordagem Euleriana

De acordo com Moreira e Vilhena (2010b), modelos Eulerianos são os mais adequados para a solução de problemas de maior complexidade, tais como o da dispersão de poluentes em regiões de terreno complexo ou a difusão e advecção de poluentes não inertes. Eles se baseiam na solução da equação de conservação de massa de espécies químicas de poluentes, para uma grade fixa no espaço-tempo, expressa em termos da concentração $C(x,y,z,t)$ (Zannetti, 1990):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u_v \nabla C + D \nabla^2 C + S \quad (23)$$

onde:

u_v : o vetor tridimensional do vento;

$D \nabla^2 C$: o termo de difusão molecular, com D sendo o coeficiente de difusão molecular;

S : é o termo que se refere ao acréscimo ou à remoção do poluente, devido geralmente aos processos de emissão (acréscimo), deposição e reações químicas (remoção);

∇ : é o operador de gradiente;

A fim de resolver a equação (23), é necessário conhecer o campo de vento u_v , o que não é possível uma vez que é extremamente variável no espaço e no tempo, desde a escala de centímetros à de quilômetros. Consequentemente, o vento é dividido em duas partes:

\bar{u}_v : o vento médio;

u'_v : as flutuações turbulentas do vento médio

Deste modo, a velocidade do vento é expressa como a soma das duas partes, média e turbulenta:

$$u_v = \bar{u}_v + u'_v \quad (24)$$

As mesmas considerações também são feitas à variável C . Os novos u_v e C são introduzidos na equação (23), gerando:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\bar{u}_v \nabla \bar{C} - \nabla \overline{u'_v C'} + D \nabla^2 \bar{C} + \bar{S} \quad (25)$$

Esta equação inclui novas variáveis cujos valores são desconhecidos, levando a um problema sem solução, pois o sistema de equações não possui solução uma vez que há mais variáveis do que equações a resolver. A solução para este problema consiste na utilização de um número finito de equações, relativo a determinado número de variáveis, parametrizando as variáveis restantes em termos de quantidades conhecidas.

Para este fim, o método mais amplamente usado é a parametrização de momentos de segunda ordem, assumindo uma analogia hipotética entre a difusão molecular e as transferências turbulentas. Tal abordagem é conhecida como a “Teoria K ”, ou teoria do fluxo-gradiente, uma vez que ela assume que o fluxo de um dado campo é proporcional ao gradiente de uma variável média apropriada. Este é o fechamento de primeira ordem do conjunto de equações em questão, uma vez que ele conserve as equações relativas aos primeiros momentos e parametriza os segundos momentos (Moreira e Vilhena, 2010b):

$$\overline{u'_v C'} = -K \nabla \bar{C} \quad (26)$$

onde K é o coeficiente de difusividade turbulenta.

A simplicidade da Teoria K da difusão turbulenta tem levado à sua ampla utilização como a base matemática de muitos modelos voltados à simulação do impacto de poluentes na atmosfera. Contudo, ela possui suas próprias limitações. Em contraste com a difusão molecular, a difusão turbulenta é dependente da escala, o que significa que a taxa da difusão de uma nuvem de material geralmente depende das suas dimensões e da intensidade da turbulência. Na medida em que a nuvem cresce, maiores turbilhões são incorporados no processo de expansão, de forma tal que progressivamente uma fração maior de energia cinética turbulenta se torna disponível para a expansão da nuvem. Entretanto, turbilhões muito maiores que a própria nuvem são relativamente pouco importantes para sua expansão. Assim, a teoria do gradiente funciona melhor quando a dimensão do material dispersado é muito maior que o tamanho dos turbilhões que envolvem o processo de difusão, ou seja, para emissões a nível do solo e para uma escala temporal maior. Em outras palavras, o coeficiente de difusão não deve ser somente função da estabilidade atmosférica e da altura de emissão, mas também do tempo ou distância da fonte. Todavia tal dependência do tempo torna difícil o tratamento da equação de difusão em um sistema de coordenadas fixo, onde múltiplas fontes tem que ser tratadas simultaneamente. De outro modo, é necessário limitar a aplicação da teoria do gradiente à escala de tempos maiores. Outras limitações também são apontadas, como as que se referem à natureza da difusão turbulenta, pois esta não é uma propriedade de fluídos, mas sim de fluxos, o que pode variar significativamente de um fluxo para outro, e de uma região para outra no mesmo fluxo. As relações acima descritas são essencialmente baseadas somente numa analogia qualitativa entre a difusão molecular e a turbulenta. Para que o fechamento de primeira ordem seja realístico, o campo de concentração média precisa ter uma escala temporal muito maior que o do transporte turbulento.

Apesar de todos esses limites conhecidos, a Teoria K é amplamente utilizada em diversas condições atmosféricas, pois ela descreve o transporte difusivo em uma estrutura Euleriana. Ela é capaz de produzir resultados tão condizentes com dados experimentais quanto qualquer outro modelo de maior complexidade matemática, porém com menor custo computacional. A confiabilidade da Teoria K é grandemente dependente da forma como a difusividade turbulenta é determinada na base da estrutura turbulenta da CLP, e na habilidade do modelo em reproduzir os dados experimentais de difusão. Neste sentido, uma grande variedade de formulações existe, sendo que a maioria se baseia na teoria da similaridade.

Considerando o tensor K (3×3) da difusão turbulenta, o qual pode ser inferido a partir de experimentos, e assumindo que ele é diagonal, que a difusão molecular é desprezível, e que C representa a concentração de um poluente não reativo, a equação (25) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\overline{u_v} \nabla \overline{C} + \nabla K \nabla \overline{C} + S \quad (27)$$

Caso haja valores de entrada para u_v , K e S , em conjunto com condições iniciais e de fronteira para C , a equação (27) pode ser integrada analiticamente, obtendo-se soluções exatas, ou numericamente, obtendo-se soluções aproximadas. Em geral, soluções analíticas, tais como a famosa solução da pluma Gaussiana, possuem um baixo custo computacional (se comparadas com as respectivas soluções numéricas), porém, como não há uma solução geral para as equações que descrevem o transporte e a difusão de poluentes na atmosfera, elas geralmente se baseiam em simplificações que podem não representar de maneira realística as concentrações de poluentes na atmosfera. Por outro lado, soluções numéricas possuem considerável custo computacional, o que muitas vezes inviabiliza a sua utilização, contudo oferecem a possibilidade de se usar qualquer função de $C(x,y,z,t)$ e de $K(x,y,z,t)$ para a solução do problema em questão, permitindo uma abordagem mais realística do comportamento dos poluentes na atmosfera.

As simulações numéricas são baseadas na equação de Navier-Stokes, que contém todos os detalhes da turbulência no fluxo. Se a equação é resolvida numericamente para toda a faixa de escalas, uma simulação numérica direta (*direct numerical simulation*, DNS) é feita. Entretanto, é necessário um grande poder computacional para a realização de DNS, o que em geral não se tem à disposição. Assim, uma alternativa a essa abordagem é a utilização da técnica de simulação de grandes turbilhões, ou *large-eddy simulation* (LES), que busca simular somente as escalas de movimento numa certa faixa de escalas entre os menores turbilhões (responsáveis pela dissipação de calor e quantidade de movimento) e os maiores (responsáveis pelo transporte). Essa técnica basicamente envolve resolver as maiores escalas explicitamente, parametrizando as menores escalas (escalas de subgrade), especialmente porque há pouco ou nenhum dado sobre as flutuações médias. Esta técnica tem sido utilizada com sucesso nas últimas décadas no estudo dos processos turbulentos. Atualmente, a

utilização de LES tem se tornado a melhor fonte de dados para a modelagem dos fenômenos turbulentos que ocorrem na camada limite atmosférica (Moreira e Vilhena, 2010b).

2.9.2 Abordagem Lagrangeana

A abordagem Lagrangeana difere da Euleriana por adotar um sistema de referência que segue o movimento atmosférico, decompondo a nuvem de poluente em elementos discretos, tais como segmentos, partículas computacionais ou *puffs* (Moreira e Vilhena, 2010b). Modelos Lagrangeanos, portanto, se baseiam nesta ideia, de que esses segmentos se movem na atmosfera através de trajetórias determinadas pelo campo de vento, pelo empuxo térmico e pelos efeitos da turbulência atmosférica. O cálculo dessas trajetórias envolve solucionar uma equação diferencial ordinária, o que se torna computacionalmente mais fácil de resolver. A distribuição final destes segmentos fornece uma estimativa estocástica do campo de concentração, que pode ser feita usando uma abordagem em que cada segmento é um ponto específico e, assim, a distribuição final destes numerosos pontos é usada para estimar o campo de concentração (modelos de trajetória), ou ainda usando uma abordagem em que se assume uma dispersão Gaussiana dentro de cada segmento e o campo de concentração final é dado pela superposição dessas distribuições Gaussianas (modelos de *puff*).

A vantagem da abordagem Lagrangeana sobre a Euleriana é que nenhuma grade é utilizada, evitando erros causados pela discretização espacial, permitindo que os resultados sejam interpolados a qualquer grade. Efeitos de deposição e decaimento físico-químico podem ser tratados como um termo de decaimento dependente do tempo dentro de cada segmento. Entretanto, o tratamento de reações químicas somente pode ser considerado caso haja uma grade disponível, requerendo que o tratamento de poluentes reativos ocorra mediante uma interpolação sobre uma grade a cada passo de tempo, o que por sua vez introduz erros de truncamento ao modelo.

Quando comparados com modelos Eulerianos, os Lagrangeanos são mais eficientes próximos às fontes emissoras, onde uma grade computacional deveria ser muito fina para ser capaz de manipular grandes gradientes. Por outro lado, simulações de maior alcance requerem progressivamente mais segmentos, que causam um aumento rápido do custo computacional à medida em que o tamanho do domínio aumenta. Por isso, tem-se utilizado abordagens que mesclam as vantagens de ambas, através da utilização de modelos Lagrangeanos para avaliação próxima à fonte, e de modelos Eulerianos para distâncias maiores e para poluentes reativos (Lagzi et al., 2013).

A equação da trajetória de um segmento pode ser escrita como uma equação diferencial ordinária:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} + \vec{v}_t \quad (28)$$

onde:

\vec{r} : a posição da partícula;

\vec{v} : vetor velocidade do segmento, incluindo a advecção, o empuxo térmico e a deposição;

\vec{v}_t : vetor de flutuação turbulenta;

O termo de flutuação turbulenta pode ser estimado como um passeio aleatório em um fluido viscoso, o qual é descrito pela equação de Langevin (Moreira e Vilhena, 2010b; Lagzi et al., 2013):

$$d\vec{v}_t = a(\vec{r}, \vec{v}_t, t) + \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{T_L}} dW \quad (29)$$

onde:

a : termo determinístico, que representa a força de fricção exercida pelo fluxo sobre a partícula;

σ_w : representa a flutuação da velocidade turbulenta vertical;

dW : é o processo incremental de Wiener que é Gaussiano com média zero e variância dt (flutuação vertical aleatória).

T_L : é a escala de tempo de integração Lagrangeana;

Na equação (29), o primeiro componente é um termo de memória que representa autocorrelação, enquanto que o segundo componente descreve um passeio aleatório. A escala de tempo Lagrangeana T_L é o parâmetro chave e é em geral explicitamente dado ou computado a partir de flutuações de velocidade. Quando há valores grandes de T_L , a

autocorrelação se torna pequena, e a difusão turbulenta pode ser estimada como um passeio aleatório não correlacionado, que somente é razoável para casos de simulações de distâncias maiores. No entanto, em alguns modelos, para fins de simplificação, somente o processo de passeio aleatório é implementado. Flutuações de velocidade são computadas a partir de coeficientes de difusão, ou definidas através de parametrizações utilizando a teoria de Monin-Obukhov (Lagzi et al., 2013).

2.10 ASCENSÃO DA PLUMA

Uma variável importante que precisa ser considerada na dispersão de poluentes é a altura efetiva em que a emissão ocorre, em relação ao solo. E, em se tratando de fontes em que o poluente é lançado com determinada quantidade de movimento e energia cinética, como no caso de chaminés e de nuvens de exaustão de foguetes, é de fundamental importância a correta modelagem do problema. Portanto, a ascensão da pluma se refere à altura efetiva em que os fenômenos de advecção e difusão (dentre outros) passam a fazer efeito sobre o poluente emitido.

A ascensão da pluma de poluentes pode acontecer devido a dois fatores principais: à quantidade de movimento (ou simplesmente momentum) da emissão, a qual é o produto da massa do material emitido pela sua velocidade de saída a partir da fonte, e à diferença entre as densidades do material sendo liberado e do ar ambiente, fazendo com que o material, geralmente mais quente que o ar ambiente e, portanto, menos denso, sofra a ascensão devido ao empuxo térmico. Em geral, se a temperatura de saída do material for maior que 10 a 15°C em relação ao ar ambiente, então a ascensão da pluma atribuída às forças de empuxo térmico serão maiores que as atribuídas às forças de momentum. No caso de emissões devido a processos de queima (como incêndios ou explosões), as forças de empuxo térmico são muito mais significativas do que as de momentum. Em geral, as forças de momentum somente têm efeito durante os primeiros 30 a 40s após a emissão, enquanto que o empuxo térmico permanece em ação até que uma quantidade suficiente do ar ambiente se misture ao material liberado, fazendo com que este se estabilize. Dependendo da turbulência, o efeito do empuxo térmico dura cerca de 3 a 4 minutos.

A fim de se calcular a altura efetiva da emissão de um determinado material devido ao fenômeno de ascensão da nuvem ou pluma de poluentes, é preciso examinar se o fenômeno é predominantemente dominado pelas forças de momentum ou de empuxo térmico, e, em seguida, calcular a distância máxima da ascensão da pluma (medida à jusante da fonte) e a

ascensão da pluma antes e depois desse ponto. No caso especial de chaminés, um fenômeno adicional que deve ser considerado para o cálculo da ascensão da pluma, é o associado à baixa pressão que existe no topo da chaminé. Um vórtice vertical surge próximo ao topo da chaminé e, como um resultado disso, a altura efetiva da chaminé se torna menor que a atual. Portanto, uma correção da altura da chaminé deve ser realizada, através da subtração empírica de uma porção da altura da chaminé, utilizando a velocidade de saída do material, a velocidade do vento na altura da chaminé, o diâmetro interno do topo da chaminé, a temperatura de saída do material, e a temperatura do ar ambiente (Assael e Kakosimos, 2010).

As formulações mais utilizadas na literatura para o cálculo da ascensão da pluma são aquelas apresentadas por Briggs (1969; 1975). A Figura 11 apresenta esquematicamente a altura efetiva da pluma após o término do processo de ascensão, e a distância final que a pluma viajou a partir da fonte até a sua estabilização. O cálculo é baseado em valores empíricos e levam em consideração a condição de estabilidade atmosférica e os termos referentes às forças de momentum e empuxo térmico.

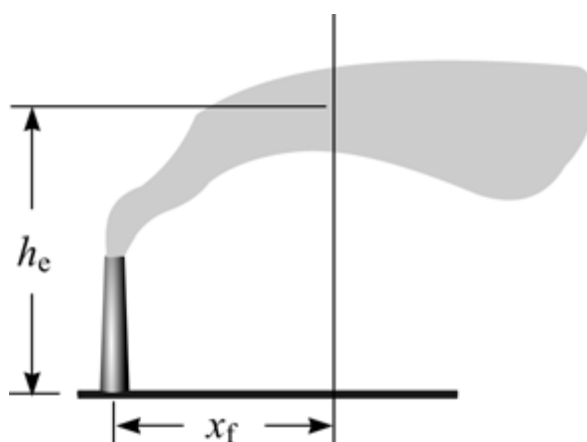


Figura 11: Esquema ilustrando o processo de ascensão da pluma, onde h_e e x_f são, respectivamente, a altura efetiva e a distância percorrida pela pluma após a sua estabilização (Assael e Kakosimos, 2010).

Neste trabalho, a representação correta e adequada do termo fonte, que é a nuvem de exaustão, está diretamente ligada à modelagem matemática do processo de ascensão da nuvem até sua estabilização. Esse processo será descrito e detalhado na Seção 4.3.

2.11 DESCRIÇÃO DO WRF

O modelo *Weather Research and Forecasting* (WRF) (Skamarock e Klemp, 2008), foi desenvolvido por um consórcio de instituições americanas formado pelo *National Center for Atmospheric Research* (NCAR), o *National Oceanic and Atmospheric Administration* (representado pelo *National Centers for Environmental Prediction* (NCEP) e o *Forecast*

Systems Laboratory (FSL)), a *Air Force Weather Agency* (AFWA), o *Naval Research Laboratory*, a *University of Oklahoma*, e a *Federal Aviation Administration* (FAA). Ele é um modelo Euleriano atmosférico tridimensional aplicável tanto para pesquisa meteorológica quanto para previsão numérica do tempo. Ele oferece diversas opções para simulação de processos físicos atmosféricos e pode ser executado em uma variedade de plataformas computacionais. O modelo WRF é apropriado para um amplo conjunto de aplicações em escalas que variam desde algumas dezenas de metros até globais, destacando-se: a modelagem para investigação meteorológica, previsão do tempo através de solução numérica em tempo real, simulações idealizadas de eventos atmosféricos, estudos e desenvolvimento de processos de assimilação de dados, acoplamento com outros sistemas de modelagem, como os modelos de qualidade do ar, dentre outros. Em se tratando deste último, vários sistemas de modelagem da qualidade do ar se utilizam de dados meteorológicos e de terreno gerados por simulações feitas utilizando-se o modelo WRF. Dentre estes, destacam-se os modelos AERMOD, CALPUFF e CMAQ, sendo que o próprio WRF possui um módulo responsável pela modelagem da qualidade do ar, denominado WRF-Chem, que simula os processos químicos, de dispersão, de transporte e de mistura de gases e partículas que ocorrem na atmosfera simultaneamente com a modelagem meteorológica. O WRF representa o estado da arte na ciência atmosférica, e é amplamente utilizado em todo o mundo, tanto para fins acadêmicos quanto para fins operacionais, e vem sendo continuamente melhorado pela comunidade científica envolvida. O WRF também possui para casos reais, em suas versões mais recentes, um módulo capaz de realizar simulações LES, adequado para simulações de altíssima resolução espacial.

2.12 DESCRIÇÃO DO CMAQ

O modelo CMAQ (*Community Multiscale Air Quality*) (Byun e Schere, 2006), desenvolvido pela agência ambiental dos EUA, a US EPA, através de sua divisão *Atmospheric Science Modeling Division* e mantido pela UNC (*University at North Carolina*), é um sistema de modelagem tridimensional Euleriano que simultaneamente modela múltiplos poluentes atmosféricos, incluindo o ozônio troposférico, material particulado, e uma variedade de gases tóxicos, auxiliando na avaliação da qualidade do ar tanto por agências reguladoras quanto por empresas poluidoras, a fim de se determinar os melhores cenários de gerenciamento da qualidade do ar para as comunidades impactadas, como também para os governos. O sistema inclui componentes responsáveis pelas emissões, meteorologia e

processos químicos, de transporte e de deposição dos poluentes. Como representa o estado da arte em modelagem da qualidade do ar, vem sendo amplamente difundido e utilizado ao redor do mundo, possuindo uma comunidade científica ativa que o mantém atualizado e que desenvolve constantes evoluções visando reduzir as incertezas nas simulações. Ele também possui um módulo que se acopla ao modelo meteorológico WRF a fim de permitir as interações entre os poluentes atmosféricos e as variáveis meteorológicas. Este é o modelo oficialmente utilizado pela US EPA, que executa diariamente a simulação das concentrações de ozônio troposférico e outros poluentes em todo o EUA para a avaliação da qualidade do ar no país, sendo recomendado pela US EPA para estudos de multi-escala da qualidade do ar. E, especialmente no caso do modelo CMAQ, o mesmo possui, em sua versão mais atual (neste momento, a versão 5.1), um módulo que trata especialmente das reações químicas dos compostos gasosos e de aerossóis formados a partir de emissões de compostos clorados (como o HCl), que compõem uma boa parte dos efluentes de foguetes, o que é um aspecto que torna o CMAQ ainda mais interessante, se comparado com outros modelos como o CALPUFF ou o WRF-Chem. Assim, uma das principais inovações que se busca é aplicar o modelo CMAQ ao caso de emissão de efluentes devido a lançamento de foguetes.

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

Para a modelagem matemática do MSRED, será retirada a hipótese de dispersão Gaussiana em y da equação de difusão-advecção resolvida para o modelo MSDEF, e será desenvolvida a solução tridimensional para a mesma, utilizando como base o trabalho de Costa et al. (2006), e publicado em Nascimento et al. (2015a) conforme será descrito com maiores detalhes a seguir. Essa solução, implementada no modelo MSRED, é uma importante e inovadora melhoria em relação ao modelo MSDEF.

A equação de difusão-advecção da poluição do ar na atmosfera é essencialmente uma declaração de conservação do material suspenso. Os fluxos turbulentos de concentração são assumidos como sendo proporcionais ao gradiente médio de concentração, o que é conhecido como a teoria de Fick. Essa suposição, combinada com a equação de continuidade, leva à equação de difusão-advecção (Blackadar, 1997):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + (w - v_g) \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \lambda c - \Lambda c \quad (30)$$

Para $0 < z < h$, $0 < y < L_y$ e $x > 0$, onde c denota a concentração média, h é a altura da camada limite atmosférica, L_y é bem distante da fonte, K_x , K_y , K_z e u , v , w são os componentes Cartesianos da difusão turbulenta e do vento, respectivamente, v_g é a deposição gravitacional, λ é o coeficiente de decaimento físico-químico e Λ é o coeficiente de remoção por chuva.

O eixo x do sistema de coordenadas Cartesiano é alinhado na direção do vento, o eixo y é orientado na direção horizontal perpendicular à direção do vento, e o eixo z na direção vertical para cima. A fim de resolver a equação (30) é assumido que a componente lateral do vento médio é zero ($v = 0$). Também, é necessário definir as condições iniciais e de fronteira: assume-se que no início da liberação do poluente a região da dispersão não está poluída:

$$c(x, y, z, 0) = 0 \quad \text{em } t = 0 \quad (31)$$

e uma fonte de emissão com taxa constante Q é assumida:

$$c(0, y, z, t) = \frac{Q}{u(z)} [\eta(t) - \eta(t - t_r)] \delta(y - y_o) \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \quad (32)$$

onde δ é a função delta de Dirac, H_s é a altura da fonte, η é a função de Heaviside e t_r é a duração da liberação (Bianconi e Tamponi, 1993).

Os poluentes estão também sujeitos às condições de fronteira:

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = h \quad (33a)$$

e

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = V_d c \quad \text{em } z = 0 \quad (33b)$$

onde V_d é a velocidade de deposição seca. Na direção y , têm-se as seguintes condições:

$$\frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = 0, L_y \quad (34)$$

Assume-se também que K_x , K_y , K_z , e a velocidade do vento u dependem somente da variável z , com w e v_g constantes. Neste momento, toma-se como base a técnica descrita por Moreira et al. (2005a; 2006) denominada “*Advection-Diffusion Multilayer Model*” (ADMM), que é uma solução semi-analítica baseada na discretização da camada limite atmosférica em subcamadas onde a equação de difusão-advecção é resolvida pela técnica da transformada de Laplace. Assim, é feita uma aproximação passo a passo, que é então aplicada ao problema (30) através da discretização da altura h em subcamadas de forma que, dentro de cada uma, valores médios de K_x , K_y , K_z e u são calculados. Assim, esse procedimento transforma o domínio do problema (30) em um sistema multicamadas na direção z . A Figura 12 apresenta uma ilustração esquematizada desse procedimento. Essa abordagem é bastante genérica no

sentido de que pode ser aplicada quando esses parâmetros são uma função contínua arbitrária da variável z .

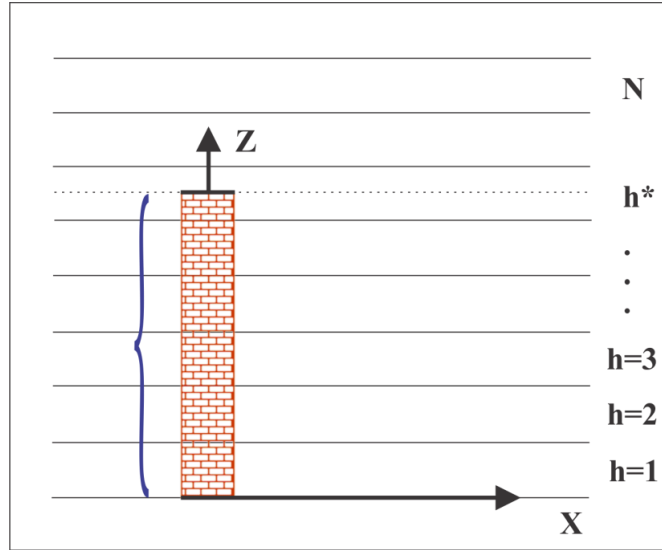


Figura 12: Esquema da CLP dividida em um sistema de multicamadas.

Neste ponto, pode-se reescrever a equação (30) como um conjunto de problemas difusivos-advectivos com parâmetros constantes, para uma determinada subcamada:

$$\frac{\partial c_n}{\partial t} + u_n \frac{\partial c_n}{\partial x} + (w - v_g) \frac{\partial c_n}{\partial z} = K_x^n \frac{\partial^2 c_n}{\partial x^2} + K_y^n \frac{\partial^2 c_n}{\partial y^2} + K_z^n \frac{\partial^2 c_n}{\partial z^2} - \lambda c_n - \Lambda c_n \quad (35)$$

para $n = 1:N$, onde N denota o número de subcamadas e c_n representa a concentração na n -ésima subcamada. Também, é necessário definir duas condições de fronteira extras, referentes às interações que ocorrem nas interfaces das subcamadas (além das condições já definidas para $z = 0$ e $z = h$):

$$c_n = c_{n+1} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (35a)$$

$$K_n \frac{\partial c_n}{\partial z} = K_{n+1} \frac{\partial c_{n+1}}{\partial z} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (35b)$$

Tais condições precisam ser consideradas a fim de ser possível determinar inequivocamente as $2N$ constantes arbitrárias que aparecem na solução do conjunto de problemas da equação (35).

Agora já é possível, a partir desse ponto, aplicar o método GITT (*Generalized Integral Transform Technique*, Cotta, 1993) na direção y . Este é um método híbrido que tem sido utilizado na solução de uma ampla e diversa classe de problemas principalmente na área de transferência de calor e dinâmica dos fluídos. A aplicação formal do método GITT começa com a escolha do problema dos autovalores associados (também conhecido na literatura como o problema auxiliar) e suas respectivas condições de fronteira:

$$\psi_i''(y) + \lambda_i^2 \psi_i(y) = 0 \quad \text{em } 0 < y < L_y \quad (36a)$$

$$\psi_i'(y) = 0 \quad \text{em } y = 0, L_y \quad (36b)$$

A solução é $\psi_i = \cos(\lambda_i y)$, onde λ_i representa as raízes positivas da expressão $\sin(\lambda_i L_y) = 0$. Então, $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_i = i\pi / L_y$. Deve-se observar que as funções $\psi_i(y)$ e λ_i , conhecidas respectivamente como os autovetores e os autovalores associados com o problema de Sturm-Liouville, satisfazem a seguinte condição de ortonormalidade:

$$\frac{1}{N_m^{1/2} N_n^{1/2}} \int_v \psi_m(z) \psi_n(z) dv = \begin{cases} 0, m \neq n \\ 1, m = n \end{cases} \quad (37)$$

onde N_m é dado por:

$$N_m = \int_v \psi_m^2(z) dv \quad (38)$$

Seguindo o formalismo de GITT, o primeiro passo é expandir a variável $c(x, y, z, t)$ na seguinte forma:

$$c_n(x, y, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_{ni}(x, z, t) \psi_i(y)}{N_i^{1/2}} \quad (39)$$

Substituindo a equação (39) na equação (35), obtém-se, assumindo-se $K_x^n = K_x; K_y^n = K_y; K_z^n = K_z$:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial t} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} + u_n \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial x} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} + (w - v_g) \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial z} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} = \\ & K_x^n \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial x^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} + K_y^n \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_{ni}(x, z, t) \frac{\psi_i''(y)}{N_i^{1/2}} + \\ & + K_z^n \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial z^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} - (\lambda + \Lambda) \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_{ni}(x, z, t) \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} \end{aligned} \quad (40)$$

onde ' e '' são usados para indicar as derivadas de primeira e segunda ordem, respectivamente.

O próximo passo é aplicar o operador $\int_0^L \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} dy$ na equação (40) e usar a equação

(36a) para observar que $\psi_i'' = -\lambda_i^2 \psi_i$. Além disso, usando a propriedade da ortonormalidade, a equação (40) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial t} + u_n \frac{\partial \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial x} + (w - v_g) \frac{\partial \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial z} = \\ & K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial x^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_{ni}(x, z, t)}{\partial z^2} - (\lambda + \Lambda + K_y \lambda_i^2) \bar{c}_{ni}(x, z, t) \end{aligned} \quad (41)$$

Para a condição da fonte (32) tem-se:

$$\sum_{i=0}^{\infty} u_n \bar{c}_{ni}(0, z, t) \int_0^L \frac{\psi_i \psi_j}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} dy = \int_0^L \frac{Q[\eta(t) - \eta(t-t_r)] \delta(z - H_s) \delta(y - y_o) \psi_j}{N_j^{1/2}} dy \quad (42)$$

Assim, desenvolvendo as integrais, obtém-se:

$$\bar{c}_n(0, z, t) = \frac{Q[\eta(t) - \eta(t-t_r)] \delta(z - H_s) \psi_i(y_o)}{u_n N_i^{1/2}} \quad (43)$$

No método GITT tradicional o problema transformado é resolvido numericamente. Neste trabalho, entretanto, o problema é resolvido utilizando a técnica da transformada de Laplace, baseado na solução de Nascimento et al. (2015a). Portanto, ao aplicar a transformada de Laplace na equação (41), chega-se à seguinte equação:

$$\frac{d^2 \hat{c}_{ni}(s, z, p)}{dz^2} - \frac{(w - v_g)}{K_z} \frac{d \hat{c}_{ni}(s, z, p)}{dz} - \frac{(p + \lambda + \Lambda + s u_n - K_x s^2 + K_y \lambda_i^2) \hat{c}_{ni}(s, z, p)}{K_z} = \frac{(K_x s - u_n) \bar{c}_{ni}(0, z, p)}{K_z} \quad (44)$$

onde $\hat{c}(s, z, p) = L\{\bar{c}(x, z, t); x \rightarrow s; t \rightarrow p\}$, com a seguinte condição inicial:

$$\hat{c}(s, z, 0) = 0 \quad \text{em } t = 0 \quad (45)$$

com a condição da fonte:

$$\bar{c}_{ni}(0, z, p) = \frac{Q}{u_n} \left(\frac{1 - e^{-pt_r}}{p} \right) \frac{\psi_i(y_o)}{N_i^{1/2}} \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \quad (46)$$

e as condições de fronteira:

$$K_z \frac{d\hat{c}(s, z, p)}{dz} = 0 \quad \text{em } z = h \quad (47a)$$

e

$$K_z \frac{d\hat{c}(s, z, p)}{dz} = V_d \hat{c}(s, z, p) \quad \text{em } z = 0 \quad (47b)$$

resultando em

$$\frac{d^2 \hat{c}_{ni}(s, z, p)}{dz^2} - A \frac{d\hat{c}_{ni}(s, z, p)}{dz} - B \hat{c}_{ni}(s, z, p) = -DQ\delta(z - H_s) \quad (48)$$

onde:

$$A = \frac{w - v_g}{K_z}; \quad B = \frac{(p + \lambda + \Lambda + su_n - K_x s^2 + K_y \lambda_i^2)}{K_z} \quad \text{e} \quad D = \frac{(1 - e^{-p t_r})}{p} \frac{(u_n - K_x s)}{u_n K_z} \frac{\psi_i(y_o)}{N_i^{1/2}}$$

A equação (48) tem a bem conhecida solução:

$$\hat{c}_{ni}(s, z, p) = G_1 e^{(R_1 + R_2)z} + G_2 e^{(R_1 - R_2)z} + \frac{(1 - e^{-p t_r})}{p} \frac{Q}{R_3} \left(e^{(R_1 - R_2)(z - H_s)} - e^{(R_1 + R_2)(z - H_s)} \right) \quad (49)$$

onde:

$$R_1 = \frac{A}{2} \quad ; \quad R_2 = \frac{B^{1/2}}{2} \quad ; \quad R_3 = \frac{N_i^{1/2} K_z}{\psi_i(y_0) \beta} [A^2 + 4B]^{1/2} \quad \text{e} \quad \beta = \left(1 - \frac{K_x s}{u_n} \right)$$

Em seguida, a concentração é obtida pela aplicação da inversão numérica da concentração transformada \hat{c}_{ni} pelo esquema da quadratura Gaussiana:

$$\bar{c}_{ni}(x, z, t) = \sum_{j=1}^{M_1} \frac{p_j}{t} a_j \sum_{k=1}^{M_2} \frac{p_k}{x} a_k \left[G_1 e^{(R_1+R_2)z} + G_2 e^{(R_1-R_2)z} + \frac{\left(1 - e^{-\frac{p_j}{t} t_r}\right)}{(p_j/t)} \frac{Q}{R_3} \left(e^{(R_1-R_2)(z-H_s)} - e^{(R_1+R_2)(z-H_s)} \right) H(z-H_s) \right] \quad (50)$$

onde:

$$R_1 = \frac{1}{2} \frac{(w-v_g)}{K_z}$$

$$R_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\frac{p_j}{t} + \lambda + \Lambda + \frac{p_k}{x} u_n \beta + K_y \lambda_i^2}{K_z} \right)^{1/2}$$

$$R_3 = \frac{N_i^{1/2} K_z}{\psi_i(y_0) \beta} \left[\left(\frac{w-v_g}{K_z} \right)^2 + 4 \left(\frac{p_j}{t} + \lambda + \Lambda + \frac{p_k}{x} u_n \beta + K_y \lambda_j^2 \right) \right]^{1/2}$$

$$\beta = \left(1 - \frac{p_k}{P_e} \right)$$

sendo M_1 o número de pontos da quadratura Gaussiana aplicada à variável t , M_2 o número de pontos da quadratura Gaussiana aplicada à variável x , $H(z - H_s)$ a função de Heaviside e

$P_e = \frac{u_n x}{K_x}$ o número de Peclet, que essencialmente representa a razão entre o transporte

advectivo e o difusivo (Moreira et al., 2005c). As constantes a_j , a_k , p_j e p_k são os pesos e as raízes do esquema da quadratura Gaussiana e são tabulados no livro de Stroud e Secrest (1966), enquanto que j e k são os pontos de quadratura.

Finalmente, usando a forma da inversa, obtém-se:

$$c_n(x, y, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} \left\{ \sum_{j=1}^{M_1} \frac{p_j}{t} a_j \sum_{k=1}^{M_2} \frac{p_k}{x} a_k \left[G_1 e^{(R_1+R_2)z} + G_2 e^{(R_1-R_2)z} + \right. \right. \\ \left. \left. \frac{\left(1 - e^{-\frac{p_j}{t} t_r} \right)}{(p_j/t)} \frac{Q}{R_3} \left(e^{(R_1-R_2)(z-H_s)} - e^{(R_1+R_2)(z-H_s)} \right) H(z-H_s) \right] \right\} \quad (51)$$

Esta equação é então truncada para um número suficientemente grande de termos do somatório da série a fim de obter a solução final do problema (35). Consequentemente, através dessa solução obtém-se a solução da equação de difusão-advecção tridimensional para uma camada limite atmosférica não homogênea.

É importante salientar que esta solução é semi-analítica, no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo do processo de derivação, exceto pela aproximação passo-a-passo do coeficiente de difusão e velocidade do vento longitudinal, a inversão de Laplace numérica da concentração transformada e o truncamento da série da solução GITT.

Portanto, após determinar o tempo de estabilização e a fonte (que são as múltiplas camadas formadas pelo particionamento da nuvem, conforme será mais bem detalhado a seguir), a concentração final do poluente em um determinado nível será a contribuição de todas as fontes:

$$C(x, y, z, t) = \sum_i^n c_i(x, y, z, t), \quad \text{onde } i = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (52)$$

onde n representa a enésima fonte devido ao particionamento da nuvem de exaustão de poluentes liberados pelo foguete no tempo de estabilização.

Para se determinar as constantes G_1 e G_2 , para cada camada, são aplicadas as $2N-2$ condições de continuidade de interface, conforme descrito no método ADMM (Moreira et al., 2005a). Deste modo:

$$\begin{aligned} \text{Em } z = 0; \quad & K_{z_1} \frac{\partial C_1}{\partial z}(s, 0, p) = 0 \\ \text{Em } z = z_I; \quad & \begin{cases} C_1(s, z_1, p) = C_2(s, z_1, p) \\ K_{z_1} \frac{\partial C_1}{\partial z}(s, z_1, p) = K_{z_2} \frac{\partial C_2}{\partial z}(s, z_1, p) \end{cases} \end{aligned}$$

Com a matriz M definida como:

$$M_{11} = R_{i1} \quad (54c)$$

$$M_{12} = -R_{i1} \quad (54d)$$

Para $n = 1, 2, 3, \dots, N$

$$M_{2n,2n-1} = e^{R_{in} z_n} \quad (54e)$$

$$M_{2n,2n} = e^{-R_{in} z_n} \quad (54f)$$

$$M_{2n,2n+1} = -e^{R_{i(n+1)} z_n} \quad (54g)$$

$$M_{2n,2n+2} = e^{-R_{i(n+1)} z_n} \quad (54h)$$

$$M_{2n+1,2n-1} = K_{zn} R_{in} e^{R_{in} z_n} \quad (54i)$$

$$M_{2n+1,2n} = -K_{zn} R_{in} e^{-R_{in} z_n} \quad (54j)$$

$$M_{2n+1,2n+1} = -K_{z(n+1)} R_{i(n+1)} e^{R_{i(n+1)} z_n} \quad (54k)$$

$$M_{2n+1,2n+2} = K_{z(n+1)} R_{i(n+1)} e^{-R_{i(n+1)} z_n} \quad (54l)$$

E por fim:

$$M_{d,d-1} = R_{in} e^{R_{in} z_n} \quad (54m)$$

$$M_{d,d} = -e^{R_{in} z_n} \quad (54n)$$

onde:

$$R_n = R_2 \tag{54o}$$

$$R_a = R_3 \tag{54p}$$

$$R_{in} = R_1 + R_2 \tag{54q}$$

$$-R_{in} = R_1 - R_2 \tag{54r}$$

4. METODOLOGIA

A fim de prover ao modelo MSRED com as informações necessárias à sua execução, algumas variáveis meteorológicas precisam ser fornecidas ao modelo, tais como perfis verticais de temperatura, direção e velocidade do vento, desde o nível do solo e em diferentes níveis na atmosfera, altura da camada limite, comprimento de Monin-Obukhov, velocidade de fricção, velocidade de escala convectiva, dentre outras. Em geral, elas são obtidas através de observações feitas nas regiões de interesse, como, por exemplo, as campanhas realizadas na região do CLA. Entretanto, tal processo envolve custos financeiros relativamente elevados, pois envolve a disponibilização de maquinários e de recursos humanos altamente especializados para sua realização. Destarte, um esforço foi empreendido neste projeto a fim fornecer tais informações meteorológicas necessárias ao MSRED através da aplicação de um modelo meteorológico a este caso. Para este fim, foi escolhido o modelo WRF.

E, com o objetivo de estudar e simular o processo de transporte químico de efluentes de foguetes na atmosfera para avaliação de longo alcance do impacto ambiental em escalas regionais, foi realizado um esforço no intuito de avaliar os modelos de qualidade do ar existentes que poderiam ser aplicados neste contexto. Assim, foi escolhido o modelo CMAQ, uma vez que, conforme já apresentado, representa o estado da arte na modelagem tridimensional regional do transporte químico de poluentes, é utilizado operacionalmente pela agência ambiental norte americana (US EPA), e por ser capaz de lidar com compostos clorados, especialmente o HCl, visto este ser um dos principais poluentes emitidos durante o lançamento de foguetes.

O modelo MSRED foi concebido com base no modelo MSDEF, porém com as seguintes melhorias:

- Solução tridimensional semi-analítica da equação de difusão-advecção, o que permite a utilização de coeficientes de difusividade tridimensionais, visando à representação mais realística da turbulência atmosférica, com base na Teoria K ;
- Integração com o modelo meteorológico WRF, utilizando as informações derivadas do modelo, tais como variáveis meteorológicas, definições de grade, georreferenciamento de pontos receptores e perfis verticais;
- Integração com o modelo fotoquímico CMAQ para a modelagem do transporte químico de longo alcance, através da geração das condições iniciais a partir da modelagem de curto alcance realizada pelo MSRED;

- Melhoria na representação do termo fonte, ou seja, da nuvem de exaustão de foguetes, através da incorporação de novas formulações que consideram cada tipo de lançamento e condição de estabilidade atmosférica;
- Incorporação de novas parametrizações da turbulência atmosférica, a fim de computar os coeficientes tridimensionais de difusividade turbulenta K_x , K_y e K_z ;
- Utilização da componente vertical do vento na solução da equação de difusão-advecção, a fim de melhor representar o termo advectivo da equação na direção z ;
- Cômputo da velocidade de deposição seca dependente da altura z , ao invés de somente para o nível de superfície, utilizando as informações disponibilizadas pelo modelo WRF para cada camada meteorológica, considerando cada condição de estabilidade atmosférica;
- Projeto e codificação do modelo visando à utilização de modernas bibliotecas para manipulação de arquivos em formato amigável capaz de ser utilizado para análise, georreferenciamento e pós-processamento, e à melhoria do desempenho através do desenvolvimento de código computacional que permita a utilização do modelo em computação de alto desempenho;

A seguir é apresentada, para cada objetivo específico, a metodologia que foi aplicada para o desenvolvimento deste trabalho, descrevendo em detalhes cada melhoria feita no MSRED em relação ao seu antecessor, o MSDEF.

4.1 DESENVOLVER A SOLUÇÃO TRIDIMENSIONAL SEMI-ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO

O trabalho de Nascimento et al. (2015a) foi desenvolvido visando atender esse objetivo, e nesta tese está apresentado com maiores detalhes no Capítulo 3.

4.2 PROJETAR E CODIFICAR O MODELO MSRED

O MSRED foi projetado para ser um modelo capaz de se integrar com as principais ferramentas na área de modelagem computacional da qualidade do ar. Assim, os desafios não foram poucos:

- a. integração com o modelo WRF a fim de ler sua saída para utilização como entrada de dados meteorológica;

- b. integração com o modelo CMAQ para geração das condições iniciais para a modelagem do transporte químico para avaliação de longo alcance;
- c. geração de saída contendo o campo de concentração para um determinado tempo com informações para georreferenciamento da grade de receptores, em formato que permita o pós-processamento de maneira ágil e fácil;
- d. configuração das opções de modelagem que permita ao operador selecionar que cenário de lançamento de foguete deseja simular;
- e. execução da modelagem de maneira amigável por parte do operador num tempo de modelagem que permita a adequada avaliação de curto alcance; e
- f. a utilização de modernos recursos científicos e computacionais que garantam o desenvolvimento de toda essa gama de funcionalidades.

A seguir, serão detalhados os principais aspectos do projeto e desenvolvimento do modelo MSRED, com foco na solução dos desafios ora apresentados.

4.2.1 Projeto do Sistema de Modelagem

O sistema foi projetado para se integrar com os modelos WRF e CMAQ. Para este fim, cada aspecto de seu projeto foi desenvolvido de forma a garantir o perfeito acoplamento entre os diferentes modelos, através de uma cadeia de execução bem definida, utilizando um projeto de sistema baseado em três camadas: a camada de apresentação, a camada de persistência e a camada de negócio. A estrutura básica da cadeia de execução do modelo MSRED é apresentada na Figura 13.

A camada de apresentação de um sistema se refere à interface que este oferece ao usuário para sua configuração e execução, podendo ela ser gráfica (GUI – *Graphical User Interface*) ou não, como, por exemplo, a interface de linha de comando (LCI – *Line Command Interface*). Considerando que este é modelo computacional construído para ser executado em ambiente Linux através de interface de linha comando, a interface básica disponível ao usuário para sua configuração e execução é um conjunto de arquivos que deverão ser editados pelo usuário a fim de executar o modelo.

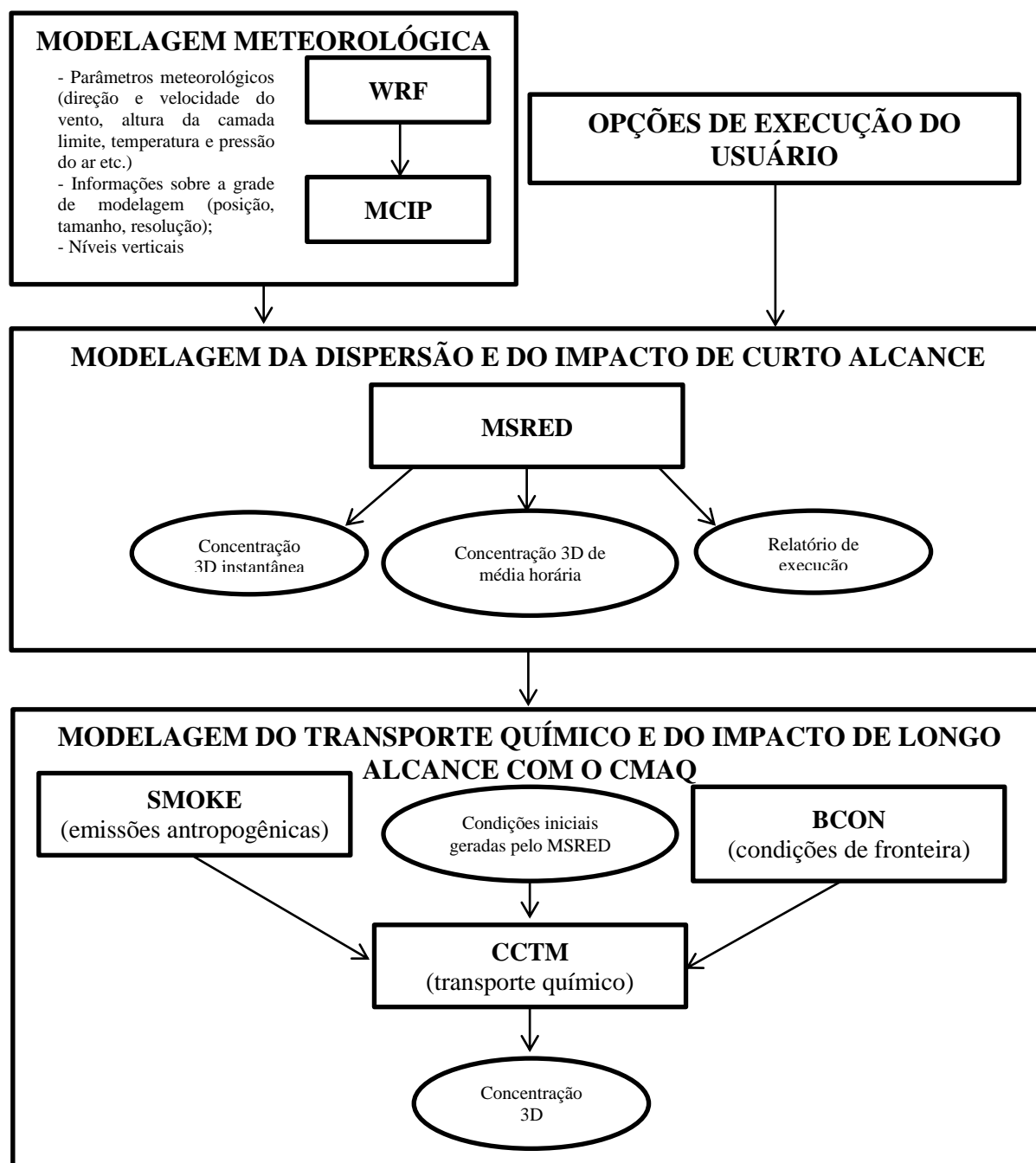


Figura 13: Fluxograma ilustrando a cadeia de execução do sistema de modelagem.

A camada de persistência de dados visa facilitar o desenvolvimento e execução de um programa de computador através do encapsulamento dos mecanismos necessários à formatação, leitura e gravação dos dados de um determinado sistema. Esses mecanismos são de vital importância ao correto funcionamento de qualquer sistema, visto que, se não forem corretamente projetados e desenvolvidos no que diz respeito aos requisitos de desempenho, confiabilidade, escalabilidade e transparência, poderão impactar severamente no resultado final do sistema. Em sistemas computacionais tradicionais, esses dados são gerenciados por

um sistema de persistência à parte, chamado de “sistema de gerenciamento de banco de dados”, ou SGBD, que além de implementar todos os processos para a gravação, leitura e formatação dos dados, também implementa outros mecanismos de adicionais, como de busca, auditoria e controle de acesso. No entanto, em sistemas que exigem computação de alto desempenho, a utilização de SGBDs pode impor algumas restrições, principalmente ao desempenho e à possibilidade de se transportar os arquivos de dados gerados para outras plataformas de modelagem ou de pós-processamento. Neste sentido, devem-se buscar mecanismos de persistência mais aderentes à realidade do sistema a ser desenvolvido.

A camada de negócio, por sua vez, tem como intuito encapsular todas as rotinas, procedimentos, funções e métodos que implementam a inteligência computacional do sistema em questão. Ou seja, é nesta camada que se encontram codificadas as regras de negócio, o coração do sistema. Ela interage com a camada de apresentação a fim de obter as informações de configuração, execução e apresentação dos resultados, bem como com a camada de persistência, a fim de ler os dados a serem processados e gravar os resultados de seu processamento. Nela são realizadas as operações de cálculos, transformações, passos iterativos, comunicações entre processos, validações e controle de fluxo de dados e de processos.

4.2.2 Camada de Persistência de Dados

Boa parte dos desafios se refere à escolha do mecanismo de persistência de dados a ser utilizado no modelo. Sabendo que os modelos WRF e CMAQ se utilizam do formato netCDF (Unidata, 2015) para formatação de suas respectivas saídas, e sendo este o mais largamente utilizado pela comunidade científica, foi o escolhido para ser utilizado pelo MSRED como a camada de persistência de dados.

Apesar de todas as vantagens que o formato netCDF oferece, ele se limita a fornecer meios para a persistência de dados científicos. Cada programa ou modelo computacional que o utiliza define como será a estrutura e o padrão de dados internos de seus arquivos, em termos das dimensões, variáveis, atributos globais e atributos de variáveis. Assim, embora o WRF e o CMAQ utilizem o netCDF, cada modelo utiliza uma maneira diferente de representar seus dados utilizando o mecanismo de persistência disponibilizado pelo netCDF. O CMAQ possui um módulo chamado MCIP (*Meteorology-Chemistry Interface Processor*, Otte e Pleim, 2010), responsável por realizar o pré-processamento meteorológico dos dados de saída do WRF para o formato de dados usado por todo o conjunto de aplicativos do

CMAQ. Este formato, construído sobre a plataforma de persistência do netCDF, é definido pela interface de programação denominada *Models-3/EDSS Input/Output Applications Programming Interface* (I/O API). Esta biblioteca fornece um conjunto de funcionalidades que facilitam o trabalho de desenvolvimento, tais como a estruturação dos dados, funções de geoprocessamento, leitura e gravação de dados, além de fornecer um formato aceito por uma grande variedade de aplicações de análise e pós-processamento de dados de modelagem, tais como o *Visualization Environment for Rich Data Interpretation* (VERDI), *Integrated Data Viewer* (IDV), *Atmospheric Model Evaluation Tool* (AMET), R, Matlab, Octave e SciPython. Deste modo, como o modelo MSRED precisará gerar arquivos prontos para serem usados pelo CMAQ para entrada de condições iniciais, como já existe um pré-processador meteorológico que disponibiliza os dados de saída do WRF no formato I/O API, e como há uma grande variedade de aplicações que permitem a análise e pós-processamento de arquivos neste formato, esta biblioteca foi, portanto, escolhida para ser utilizada no projeto e desenvolvimento do novo modelo. Portanto, o modelo MSRED foi desenvolvido utilizando a linguagem FORTRAN, uma poderosa linguagem de programação largamente utilizada em aplicações científicas, permitindo a integração do MSRED com os modelos WRF e CMAQ através da utilização das bibliotecas netCDF e I/O API.

4.2.3 A Camada de Apresentação

O MSRED possui um arquivo de configurações de entrada que permite ao operador selecionar que cenário será simulado pelo modelo. As configurações pertinentes a esse arquivo são listadas na Tabela 1.

Tabela 1: Relação das configurações do MSRED, na ordem em que são apresentadas no arquivo de entrada.

Item	Configuração	Exemplo de Valor
1	Tipo de lançamento. Normal: 1; Abortado/explosão: 2	1
2	Taxa de emissão total do foguete (kg/s)	520
3	Quantidade de calor liberado pelo foguete (cal/g)	1600
4	Ativar deposição seca. Ativado: 1; Desativado: 0	1
5	Coeficiente de decaimento radioativo (meia-vida, em horas), para o composto HCl	24
6	Latitude, em graus, do local de lançamento	-2.3172
7	Longitude, em graus, do local de lançamento	-44.368
8	Intervalo, em minutos, para o cálculo e saída da concentração calculada no tempo	10
9	Hora do lançamento (GMT), sendo 0 (zero) a primeira hora de modelagem, conforme advindo do WRF/MCIP	26
10	Duração da simulação, em horas, contado a partir da hora do lançamento	1
11	Hora (GMT) para saída da média da concentração horária, para geração das condições iniciais para modelagem do transporte químico no CMAQ. Esta hora deve estar contida entre a hora do lançamento e a	27

	duração da simulação	
12	Tempo, em segundos, para queima do combustível (total ou parcial, veja opção abaixo), em caso de lançamento abortado ou de explosão	300
13	Percentual de combustível queimado durante o tempo de queima do combustível, em caso de lançamento abortado ou de explosão	100

Além de configurar o cenário de modelagem, o operador precisa informar ao modelo quais são os arquivos de entrada e saída. Isso é feito mediante a configuração de variáveis de ambiente, cada uma correspondendo a um determinado arquivo de entrada/saída do modelo. A Tabela 2 apresenta a relação das variáveis de ambiente e de seu respectivo arquivo de entrada ou saída.

Tabela 2: Listagem dos arquivos de entrada e saída, juntamente com suas respectivas variáveis de ambiente.

Variável de Ambiente	Descrição do Arquivo	Exemplo de Valor
METCRO2D	Arquivo de entrada meteorológica proveniente do MCIP, contendo as variáveis meteorológicas modeladas pelo WRF nas dimensões tempo, linha e coluna, para o centro de massa (CROSS) de cada ponto de grade.	METCRO2D_d03
METCRO3D	Arquivo de entrada meteorológica proveniente do MCIP, contendo as variáveis meteorológicas modeladas pelo WRF nas dimensões tempo, camada, linha e coluna, para o centro de massa (CROSS) de cada ponto de grade.	METCRO3D_d03
METDOT3D	Arquivo de entrada meteorológica proveniente do MCIP, contendo as variáveis meteorológicas modeladas pelo WRF nas dimensões tempo, camada, linha e coluna, para as faces U e V (DOT) de cada ponto de grade.	METDOT3D_d03
MSREDINPFILE	Arquivo de entrada do MSRED, contendo as configurações para seleção do cenário a ser modelado	msredinp.dat
MSREDCONC	Arquivo de saída do MSRED, contendo as concentrações dos poluentes calculadas no tempo	msredconc.ncf
MSREDICON	Arquivo de saída do MSRED, contendo as concentrações de média horária dos poluentes, para a hora configurada para geração das condições iniciais para o CMAQ	msredicon.ncf
GRIDNAME	Nome da grade, conforme configurado no arquivo GRIDDESC do MCIP	Alcantara

4.2.4 A Camada de Negócio

O MSRED foi projetado em módulos, de forma que cada regra de negócio possa ser modificada ou eventualmente corrigida sem a necessidade de se modificar o fluxo principal e a cadeia de execução do modelo. Cada regra de negócio foi codificada em unidades de programação independentes (arquivos de extensão *.f90*), e as variáveis ou constantes de uso global foram incorporadas em unidades especiais chamadas de *module* (arquivos de extensão *.mod*). Ele foi construído para simular a dispersão da nuvem de exaustão de efluentes de foguetes para lançamentos normais e para lançamento abortados (explosão). Para o caso de lançamento normal, é assumida a hipótese de que todos os motores do foguete e o sistema de lançamento estejam operando normalmente. Já no caso de falha no lançamento (explosão), é

assumida a hipótese de ruptura dos motores, espalhando propelente sólido sobre a área na vizinhança da plataforma de lançamento. O propelente sólido espalhado continua a queimar em um longo período de tempo a taxa constante, ao contrário do que acontece no caso de lançamento normal, em que o tempo de queima do propelente é muito pequeno, cerca de 15s (Moreira et al., 2010a). A taxa de emissão, calor efetivo e tempo de queima usados nas simulações do VLS são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3: Relação da taxa de emissão e calor efetivo do propelente para cada tipo de lançamento para o VLS.

Informação	Lançamento Normal	Lançamento Abortado
Taxa de emissão Q (g/s)	$5,2 \times 10^5$	$1,36 \times 10^5$
Calor efetivo H (cal/g) contido no combustível	$1,6 \times 10^3$	10^3

A taxa de emissão para lançamento normal foi obtida fazendo a média da taxa de emissão dos 4 motores do VLS por um período aproximado do “*lift-off*” até o veículo estar a uma altura de 3.000 m acima da superfície. Para o caso de lançamento abortado, em que ocorre a queima lenta (explosão), a taxa é uma média sobre o tempo total de queima dos propelentes espalhados (Moreira et al., 2010a).

A Tabela 4 apresenta os constituintes da nuvem de exaustão, juntamente com os percentuais das frações do peso total dos produtos liberados na queima do propelente, que são utilizados para se determinar a taxa de emissão de cada poluente em cada partição da nuvem, multiplicando pela taxa de liberação escolhida pelo operador. O MSRED é capaz de processar simultaneamente os poluentes que derivam da queima do propelente. Os constituintes que causam impacto sobre a qualidade do ar e que, portanto, são considerados no modelo, são: dióxido de carbono (CO_2), monóxido de carbono (CO), cloreto de hidrogênio (HCl) e alumina (Al_2O_3), sendo os três primeiros gases e o último material particulado.

Tabela 4: Composição básica dos constituintes presentes na combustão do propelente no 1º, 2º e 3º estágio do VLS (Moreira et al., 2010a).

Constituinte	% m/m	Peso Molecular
Dióxido de carbono (CO_2)	4,4	44
Monóxido de carbono (CO)	27,6	28
Ácido clorídrico (HCl)	21,6	36,5
Óxido de alumínio (Al_2O_3 sólido)	28,2	102
Vapor d’água (H_2O)	7,0	18
Nitrogênio (N_2)	8,4	28
Hidrogênio (H_2)	2,8	2

A seguir será apresentado com detalhes cada aspecto da camada de negócio do MSRED.

4.2.4.1 A Estrutura do Código

A Tabela 5 apresenta o pseudocódigo do modelo, destacando sua cadeia de execução com as principais funções que são executadas durante a modelagem. Cada linha do pseudocódigo sumariza o que é executado no modelo, na ordem em que foi implementado.

Tabela 5: Pseudocódigo do modelo MSRED.

1	Programa MSRED
	Inicialização:
2	Inicializa as variáveis internas;
3	Inicializa o mecanismo de processamento paralelo (<i>MPI</i>);
4	Lê as definições de entrada do usuário;
5	Inicializa os arquivos e as variáveis de dados meteorológicos;
6	Valida os dados de entrada;
7	Abre os arquivos de saída para escrita;
8	Calcula a divisão de esforço computacional para cada processo;
	Execução:
9	<i>para cada</i> hora de modelagem <i>faça</i> :
10	Lê os dados meteorológicos;
11	<i>se</i> primeira hora <i>então</i> :
12	Determina a estabilidade atmosférica;
13	Calcula o termo fonte (altura, dimensão, tamanho, formato, taxa de emissão, tempo de estabilização e particionamento da nuvem de exaustão após sua estabilização);
14	Calcula os coeficientes de turbulência atmosférica (K_x , K_y e K_z);
15	<i>fim se</i>
16	<i>para cada</i> subintervalo de tempo <i>faça</i> :
17	<i>para cada</i> poluente <i>faça</i> :
18	Calcula o coeficiente de decaimento físico-químico;
19	Calcula a velocidade de deposição seca;
20	Calcula o coeficiente de remoção por chuva;
21	<i>para cada</i> partição da nuvem <i>faça</i> :
22	Determina a taxa de emissão Q desta partição;
23	<i>para cada</i> posição x da grade <i>faça</i> :
24	<i>para cada</i> posição y da grade <i>faça</i> :
25	<i>para cada</i> posição z da grade <i>faça</i> :
26	Calcula a concentração para o tempo atual no ponto (x, y, z) para esta fonte (partição da nuvem);
27	<i>fim para</i>
28	<i>fim para</i>
29	<i>fim para</i>
30	<i>fim para</i>
31	Coleta as concentrações calculadas por todos os processos;
32	<i>para cada</i> posição x da grade <i>faça</i> :
33	<i>para cada</i> posição y da grade <i>faça</i> :
34	<i>para cada</i> posição z da grade <i>faça</i> :
35	<i>para cada</i> partição da nuvem <i>faça</i> :
36	Calcula a concentração total no ponto (x, y, z) ;
37	<i>fim para</i>
38	Transforma a grade de modelagem para a grade final;
39	Converte a concentração final para a unidade de saída;
40	<i>fim para</i>
41	<i>fim para</i>
42	Interpola as concentrações que foram zeradas devido ao processo de rotação;
43	Grava as concentrações calculadas no tempo no respectivo arquivo de saída;
44	<i>se</i> tempo atual igual a hora para geração das condições iniciais <i>então</i> :
45	Grava as concentrações médias da última hora no arquivo de saída de

	condições iniciais para entrada no modelo CMAQ;
46	<i>fim se</i>
47	<i>fim para</i>
48	<i>fim para</i>
49	<i>fim para</i>
50	<i>fim para</i>
	Finalização:
51	Libera os recursos alocados e finaliza o mecanismo de processamento paralelo (<i>MPI</i>);
52	Fim Programa MSRED

As linhas 2-8 são responsáveis pela inicialização do modelo. Notadamente, é nesta etapa em que as opções de execução do usuário são lidas, os arquivos de entrada são inicializados, as validações das entradas são realizadas, os arquivos de saída são abertos para escrita, e são feitos os cálculos de divisão de esforço computacional entre os processos com base nas opções de execução e no tamanho da grade de modelagem definidos pelo usuário.

Em seguida (linha 9), a fase da execução da modelagem propriamente dita é iniciada com o laço iterativo para cada hora de modelagem definida nas opções de entrada do modelo. Para cada hora, todas as variáveis meteorológicas necessárias são lidas (linha 10), e, no caso de ser a primeira hora de modelagem (linhas 11-14), é determinada a estabilidade atmosférica (ver Seção 4.2.4.3.1), e são calculadas todas as informações que o modelo precisa para representar o termo fonte, que é a nuvem de exaustão devido a lançamento normal ou abortado, tais como a ascensão, dimensão, tamanho, formato, deslocamento horizontal e vertical, taxa de emissão, tempo de estabilização e particionamento da nuvem de exaustão. Em seguida, os coeficientes tridimensionais de turbulência K_x , K_y e K_z são calculados (ver Seção 4.4). Neste momento, é iniciado um novo laço iterativo para cada intervalo de tempo de modelagem definido na entrada pelo usuário para o cálculo e saída da concentração (ver item 8 da Tabela 1). Então, para cada poluente liberado na nuvem de exaustão (linhas 18-20), são calculados o coeficiente de pseudorreação química de primeira ordem (ver Seção 4.2.4.3.2), a velocidade de deposição seca (ver Seção 4.2.4.3.3) e o coeficiente de remoção por chuva (ver Seção 4.2.4.3.4). Então, segue-se o laço iterativo responsável por calcular, para cada partição da nuvem, a concentração do poluente em questão devido a esta partição para cada ponto da grade (linhas 21-30). A fração da taxa de emissão Q correspondente à partição é calculada e, para cada ponto de grade (x,y,z) , é aplicada a rotina de cálculo da concentração para um determinado tempo usando a solução semi-analítica tridimensional da equação de difusão-advecção (ver Capítulo 3). Depois (linhas 31-41), o modelo coleta todas as concentrações calculadas pelos processos de acordo com a estratégia de paralelismo computacional implementada (ver Seção 4.2.4.3.5), e calcula a concentração final para cada ponto da grade

através da soma das concentrações devido à contribuição de todas as fontes, isto é, de todas as partições da nuvem de exaustão. Uma vez que neste momento a grade está orientada na direção x sem levar em consideração a direção do vento, é feita uma transformação de coordenadas a fim de girar a grade na direção correta. Também, a unidade de volume da concentração final é calculada de acordo com o poluente. As linhas finais desta etapa (42-50) se responsabilizam por ajustar as concentrações que porventura foram zeradas devido ao processo de transformação de grade, e por gravar os resultados nos arquivos de saída respectivos, isto é, no arquivo de concentração no intervalo de tempo deste passo, e, ao final da hora (se esta for a hora para cálculo das condições iniciais), no arquivo de concentração média horária.

Por fim, nas linhas 51 e 52, são realizadas as operações para finalização dos recursos alocados durante a execução do modelo. Maiores detalhes sobre cada etapa serão fornecidos nas seções subsequentes.

4.2.4.2 A Entrada de Dados Meteorológicos

Para o MSRED realizar o cômputo das concentrações dos poluentes, é necessário fornecer a ele os dados meteorológicos requeridos pelo sistema. Como já anteriormente explanado, o MSRED utiliza os dados provenientes da saída do modelo WRF, pós-processada pelo MCIP, para entrada de dados meteorológica. A Tabela 6 apresenta a relação de todos os parâmetros meteorológicos que são necessários à execução da modelagem com o MSRED, com suas respectivas unidades e caracterizando seu tipo. Variáveis do tipo “2D” são aquelas que se referem à superfície em uma determinada posição (x,y) na grade de modelagem (coluna, linha). Já as variáveis do tipo “3D” se relacionam à posição (x,y,z) na grade de modelagem, com o termo z se referindo a um determinado nível na direção vertical.

Tabela 6: Relação dos parâmetros meteorológicos requeridos pelo modelo MSRED.

Parâmetro Meteorológico	Unidade	Tipo
Velocidade de fricção u^*	m/s	2D
Velocidade de escala convectiva w^*	m/s	2D
Altura da camada limite atmosférica	m	2D
Comprimento de Monin-Obukhov	m	2D
Comprimento de rugosidade do solo	m	2D
Direção do vento	°	3D
Velocidade do vento	m/s	3D
Componente vertical do vento	m/s	3D
Precipitação pluviométrica	cm	2D
Pressão atmosférica	Pa	3D
Taxa de mistura de vapor d'água	Kg/kg	3D

4.2.4.3 O Núcleo do Modelo

4.2.4.3.1 Cálculo da Estabilidade Atmosférica

Determinar a estabilidade atmosférica é essencial para a realização da modelagem. Dela depende o cálculo do termo fonte e dos coeficientes de turbulência atmosférica. Para determiná-la, é utilizado como base o comprimento de Monin-Obukhov (L), conforme detalhado na Tabela 7 (Hanna et al., 1996).

Tabela 7: Relação entre o comprimento de Monin-Obukhov e a estabilidade atmosférica.

Estabilidade atmosférica	Comprimento de Monin-Obukhov (m)
Instável	$-100 \leq L < 0$
Neutra	$ L > 100$
Estável	$0 \leq L \leq 100$

4.2.4.3.2 Cálculo do Coeficiente de Decaimento Físico-Químico

O coeficiente de decaimento físico-químico representa a perda no local de origem associada a processos tais como reações químicas ou decaimento radioativo. É importante ressaltar que, enquanto o alcance da variação da concentração de um químico for pequeno, a não linearidade das reações é geralmente não reconhecida, e mesmo que seja, a reação pode em certas circunstâncias ser aproximada por uma pseudorreação de primeira ordem. Embora haja reações com as quais estaremos lidando nesse trabalho que não sejam efetivamente de primeira ordem, é razoável, para fins de modelagem de curto alcance, assumir uma redução da ordem da lei de reação, idealmente para uma pseudorreação química de primeira ordem.

Deste modo, o coeficiente é calculado utilizando a estratégia de semidesintegração ou meia-vida do composto, que é o tempo necessário para desintegrar a metade da massa do mesmo. A equação a seguir apresenta seu cálculo:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} \quad (55)$$

onde λ é o coeficiente de decaimento físico-químico, e $t_{1/2}$ é o tempo de meia-vida do composto químico, que deve ser informado pelo usuário no momento da execução (ver Tabela 1). Este coeficiente é somente aplicado ao poluente HCl, uma vez que os demais gases, CO e CO₂, possuem tempo de meia-vida muito grandes (cerca de 1-2 meses e vários anos,

respectivamente), e portanto são desconsiderados no cálculo do coeficiente de remoção por decaimento físico-químico dada a curta escala de tempo a que o modelo se destina resolver. O tempo de meia-vida do HCl é variável de acordo com as condições meteorológicas do local onde é liberado (Atkinson, 1995), podendo variar de várias horas a alguns dias (Hobbs, 2000). Valores típicos aplicados ao CLA estão em torno de 1 dia (Moreira et al., 2010a).

4.2.4.3.3 Cálculo da Velocidade de Deposição Seca

A deposição seca é o fluxo vertical descendente de uma determinada espécie, seja ela gás ou partícula, e é representada em termos de um parâmetro empírico denominado velocidade de deposição, V_d . Assim, o problema de simular o processo de deposição seca se torna o problema de simular e estimar a velocidade de deposição seca.

O cômputo de V_d para gases é baseado em três modelos de resistência (Wesely e Hicks, 1977). O processo de deposição seca pode ser visto como três passos distintos. O primeiro passo é controlado pela difusão turbulenta na camada superficial e é geralmente referenciado como o componente aerodinâmico de transferência. O segundo passo envolve a difusão do material através da subcamada laminar adjacente à superfície até o último substrato absorvivo. Este passo é chamado de componente de superfície do transporte. A solubilidade ou absorvividade do material na superfície determina o quanto do material que se difunde através da subcamada laminar é realmente removido, e o passo final é chamado de componente de transferência. As resistências de cada camada são, portanto, a resistência aerodinâmica r_a , a resistência da camada quasi-laminar r_b , e a resistência de superfície r_c , respectivamente.

A relação das três resistências com a velocidade de deposição seca para gases é dada por (Zannetti, 1990):

$$V_d = \frac{1}{r_a + r_b + r_c} \quad (56)$$

A resistência aerodinâmica para a deposição seca de gases (r_a) é dada por:

$$r_a = \frac{1}{\kappa u_*} [\ln(z_s/z_o) - \psi_c] \quad (57)$$

onde z_s é uma altura de referência (m), z_o é o comprimento de rugosidade do solo (m), κ é a constante de Von Karman ($\sim 0,4$), u_* a velocidade de fricção. O parâmetro de correção de estabilidade ψ_c é necessário a fim de se considerar os efeitos de mudanças induzidas pelo empuxo térmico nos fluxos de gradientes. Deste modo, neste trabalho, outra melhoria feita foi considerar a estabilidade atmosférica para o cálculo deste parâmetro conforme segue (Zannetti, 1990):

$$\begin{aligned} \text{caso neutro: } \psi_c &= 0 \\ \text{caso instável: } \psi_c &= 2 \ln \left[0,5 \left(1 + \sqrt{1 - 16z/L} \right) \right] \\ \text{caso estável: } \psi_c &= -5 \frac{z}{L} \end{aligned} \quad (58)$$

A resistência da camada de superfície pode ser determinada como dependente do número de Schmidt:

$$r_b = 5 \frac{S_c^{2/3}}{\kappa u_*} \quad (59)$$

onde $S_c = \frac{\nu}{D}$, sendo ν a viscosidade cinemática do ar (m^2s^{-1}) e D é a difusividade molecular do poluente (m^2s^{-1}).

As partículas são afetadas pela velocidade gravitacional v_g :

$$v_d = (r_a + r_b + r_a r_b v_g)^{-1} + v_g \quad (60)$$

onde r_b é dado por:

$$r_b = (S_c^{-2/3} + 10^{-3/S_c})^{-1} u_*^{-1} \quad (61)$$

onde S_t é o número de Stokes dado por:

$$S_t = \frac{\nu_g u_*^2}{g \nu} \quad (62)$$

Das três resistências que participam da formulação da velocidade de deposição, a resistência de superfície r_c é a mais difícil de ser descrita matematicamente, devido ao grande número e à complexidade dos mecanismos físico-químicos envolvidos. A identificação e compreensão desses mecanismos de remoção de poluentes atmosféricos à superfície é certamente uma das áreas mais desafiadoras na representação do fenômeno de deposição seca. Geralmente, r_c é estimado tendo como base aspectos teóricos baseados na solubilidade e no equilíbrio químico do poluente e na simulação de processos específicos que ocorrem na interação com a superfície (solo, vegetação, água), além de coleta de dados em experimentos que visam medir os fluxos de deposição seca para a área de interesse (Seinfeld e Pandis, 2006). Devido a esses fatores, neste trabalho, é assumida a hipótese de que os poluentes atmosféricos são removidos eficientemente pela superfície, assumindo $r_c \approx 0$.

Neste trabalho, V_d é calculada para cada nível vertical em que a camada limite atmosférica é discretizada, e não somente para o nível de superfície, caracterizando assim mais uma melhoria desenvolvida neste trabalho. Considerando a utilização de V_d na solução da equação de difusão-advecção apresentada neste trabalho, Moreira et al. (2010c) apresentam um estudo detalhado em que se aplica o efeito da velocidade de deposição sobre a solução da equação de difusão-advecção utilizando a técnica ADMM, o que apresenta bons resultados quando comparados ao experimento de difusão de Hanford, em que se utilizou dois traçadores: um gás (SF₆) e um material particulado (ZnS). Uma vez que este trabalho se baseia na técnica ADMM, esta validação se aplica também à solução implementada neste trabalho.

4.2.4.3.4 Cálculo do Coeficiente de Remoção por Chuva

O material depositado sobre o solo como resultado da lavagem pela chuva tem o seguinte coeficiente de remoção:

$$\Lambda = 5,2 \times 10^{-4} R^{0.567} \quad (\text{s}^{-1}) \quad (63)$$

onde R é taxa de precipitação pluviométrica (mm/h). Este coeficiente é aplicado aos poluentes HCl e alumina, uma vez que os mesmos são mais afetados pela precipitação pluviométrica (Bjorklund et al., 1982).

4.2.4.3.5 A Estratégia Computacional para Processamento em Paralelo

O código (linha 26 da Tabela 5) que calcula a concentração no tempo t para um determinado receptor em (x,y,z) , para o poluente p e para a partição n da nuvem, implementa computacionalmente a solução semi-analítica tridimensional da equação de difusão-advecção apresentada no Capítulo 3, cujo pseudocódigo é apresentado na Tabela 8.

Este código possui considerável custo computacional, em face das diversas operações e cálculos com ponto flutuante que são feitos e dos laços iterativos aninhados que resolvem o somatório dos termos, a inversão da transformada de Laplace pelo método de quadratura Gaussiana e a aplicação do método ADMM. Ao avaliar o código, verifica-se que sua complexidade computacional é de $O_c(ikmzO_g)$, onde O_c é a função de complexidade computacional do código apresentado na Tabela 8, i é a quantidade de termos do somatório, k e m são a quantidade de pontos da quadratura Gaussiana para inversão dos termos t e x , respectivamente, z é a quantidade de níveis verticais e O_g é a função de complexidade computacional da aplicação da eliminação de Gauss, que é $O_g(zz!)$. Assim, reescrevendo O_c a fim de incorporar O_g , obtém-se $O_c(ikmz^2z!)$.

Tabela 8: Pseudocódigo do cálculo da concentração $C(t,p,n,x,y,z)$.

1	FUNÇÃO - cálculo da concentração $C(t,p,n,x,y,z)$
2	Inicializa as variáveis internas;
3	para cada termo i do somatório em y faça:
4	Calcula os termos ψ_i , λ_y , N_i e derivados;
5	para cada ponto de quadratura Gaussiana k para inversão do termo t faça:
6	para cada ponto de quadratura Gaussiana m para inversão do termo x faça:
7	para cada nível vertical z_i faça:
8	Calcula os termos β , R_1 e R_2 ;
9	se nível vertical z_i for igual a nuvem n então:
10	Calcula os termos R_3 , Sp_{n*} e Sp'_{n*} ;
11	fim se
12	fim para
13	para cada nível vertical z_i faça:
14	Calcula os termos da matriz M ;
15	fim para

16	Aplica a eliminação de Gauss sobre a matriz M ;
17	Calcula os termos G_1 , G_2 e a concentração parcial devido aos pontos de quadratura k e m ;
18	<i>fim para</i>
19	<i>fim para</i>
20	Calcula a concentração parcial neste passo iterativo do somatório;
21	<i>fim para</i>
22	Calcula concentração final;
23	Fim FUNÇÃO

Quando se considera a complexidade computacional total do modelo avaliando as Tabelas 5 e 8 em conjunto, verifica-se que ela é da ordem de $O_{total}(tpnxyzO_c)$, onde O_{total} é a função de complexidade computacional total do modelo conforme apresentado na Tabela 5, t é a quantidade de intervalos de tempo, p é a quantidade de poluentes, n é a quantidade de partições da nuvem, x e y são a quantidade de colunas e linhas da grade de modelagem, respectivamente. Ao se incorporar O_c em O_{total} , obtém-se $O_{total}(tpnxyz^3ikmz!)$.

Portanto, considerando a análise da complexidade computacional ora apresentada, o MSRED foi concebido para permitir a utilização de computação de alto desempenho durante sua execução, além da tradicional abordagem serial. A estratégia para divisão do esforço computacional escolhida foi a de divisão do conjunto de dados de acordo com o número de processadores disponíveis. O modelo verifica a quantidade q de processadores disponibilizados para a execução, e divide o domínio na direção longitudinal – eixo x da grade computacional – em q partes iguais, gerando subdomínios com dimensões $(x/q, y, z)$. Após esse balanceamento de esforço, cada processo executa o trecho do código compreendido entre as linhas 23 a 30 (Tabela 5), somente para o subdomínio a que foi designado. Na linha 31 (Tabela 5) cada processo envia o resultado de seus cálculos ao processo raiz, que se responsabiliza por coletá-los e organizá-los em uma única matriz na memória, que será posteriormente utilizada para calcular a concentração final através do somatório de todas as concentrações calculadas (linhas 32-41). Esta estratégia garante a consistência entre as diversas variáveis que são calculadas ao longo da execução e a escalabilidade do modelo, uma vez que garante que a quantidade de tempo de processamento é inversamente proporcional à quantidade de processadores disponibilizados para sua execução, evitando condições de corrida e gargalos na comunicação entre processos e na execução dos diversos cálculos.

Para o desenvolvimento desta estratégia, foi escolhida a abordagem de paralelismo por memória distribuída utilizando o paradigma *MPI* (*Message Passing Interface*), que é largamente utilizado em computação de alto desempenho, inclusive pelos modelos WRF e CMAQ. A biblioteca escolhida que implementa este paradigma foi a *OpenMPI* (Gabriel et al.,

2004), que é uma biblioteca de código aberto moderna e amplamente utilizada, que permite a compilação e execução de código para execução em paralelo, oferecendo diversos recursos de gerenciamento e execução, dentre eles a capacidade de diferenciar *nós* de *processadores* a fim de permitir a mesclagem das abordagens de memória compartilhada e distribuída numa mesma execução, utilizando um componente interno chamado *Modular Component Architecture (MCA)*. Assim, um *nó* seria um computador que contém um ou mais *processadores*. Quando os processos trocam mensagens entre si, a biblioteca seleciona qual o melhor recurso capaz de transmitir a mensagem entre os processos. Se, por exemplo, um ou mais processos estão alocados em um mesmo nó – mas em diferentes processadores – o recurso escolhido é o barramento interno do nó, onde a memória é compartilhada pelos processos. Se, por outro lado, esses processos se encontram em nós diferentes, a biblioteca seleciona a placa de rede e a mensagem é trocada através dos dispositivos de rede entre esses nós, pois a memória está distribuída entre eles. Deste modo, a biblioteca é capaz de utilizar os recursos da memória compartilhada (primeiro caso) em conjunto com os recursos da memória distribuída (segundo caso), alcançando o melhor das duas abordagens.

4.2.4.4 As Saídas do Modelo

O modelo fornece, após sua execução, três saídas:

- um arquivo no formato I/O API contendo o campo de concentração gerado para todos os pontos da grade receptora tridimensional, para cada intervalo de tempo especificado pelo operador e para os poluentes CO₂, CO, HCl e Al₂O₃;
- um arquivo no formato I/O API contendo o campo de concentração média da hora definida pelo operador para geração das condições iniciais para entrada no CMAQ, gerado para todos os pontos da grade receptora tridimensional e para os poluentes CO, HCl e Al₂O₃;
- um relatório de execução escrito na saída padrão no formato texto para conferência dos dados lidos e gerados internamente no modelo, tais como a célula da grade de modelagem em que se encontra o centro de lançamento, a estabilidade atmosférica, tipo de lançamento, altura, raio, volume, tempo de estabilização e distância percorrida do centro de lançamento até a estabilização da nuvem de exaustão, divisão do domínio para o processamento em paralelo, direção e velocidade do vento, comprimento de Monin-Obukhov, velocidade de fricção, velocidade de escala convectiva e altura da camada limite no local de lançamento, altura dos níveis verticais, distribuição das partições da

nuvem ao longo dos níveis verticais, tempo de processamento em segundos para cada partição de nuvem, dentre outras informações.

4.3 MELHORAR A REPRESENTAÇÃO DA NUVEM DE EXAUSTÃO DE FOGUETE

A representação do termo fonte é um dos principais desafios na modelagem do impacto ambiental que efluentes de exaustão de foguetes causam na atmosfera, notadamente na região da camada limite atmosférica. Conforme Simmons (2000), plumas de exaustão de foguetes exibem uma estrutura característica. A pluma, logo que sai da tubeira do foguete, é composta por um fluido cujo núcleo é aproximadamente sem viscosidade, cercado por um manto viscoso. No manto viscoso circundante o ar se mistura com os gases de escape e as reações pós-combustão ocorrem. O núcleo não viscoso é separado da região viscosa por uma onda de choque. A pressão do fluxo externo direciona esta onda de choque no sentido do eixo, onde é finalmente refletido. Este processo se repete e assim forma-se uma estrutura periódica. Mais a jusante, na pluma que se distancia da tubeira e entranha o ar ambiente, essa estrutura se esmaece devido a efeitos dissipativos. Estudos anteriores focaram na composição química da nuvem de solo e, mais importante ainda, na disposição de toneladas de HCl produzidas nos primeiros 10 s após o lançamento, aproximadamente (Pellet et al., 1983). Foi concluído que a nuvem de solo ascende devido ao empuxo térmico, estabiliza de acordo com as condições atmosféricas, é transportada pelo vento e, por último, sofre decaimento devido ao entranhamento de ar seco e difusão natural. Esta é uma simplificação de um processo complexo que ainda inspira estudo, sendo um campo aberto à pesquisa.

Para formação da nuvem (tempo de estabilização, formato, altura de estabilização, divisão da nuvem etc.), foi seguida a abordagem apresentada no modelo MSDEF, porém com o acréscimo de importantes melhorias, visando uma melhor representação do termo fonte, que serão descritas a seguir.

4.3.1 A Ascensão da Nuvem de Exaustão

A determinação da altura de estabilização da nuvem de exaustão para lançamentos normais e da pluma gerada para falhas de lançamento é um importante fator no cálculo da concentração, pois, em geral, a concentração máxima calculada na superfície da Terra é inversamente proporcional ao cubo da altura de estabilização (Bjorklund et al., 1982). No

caso de lançamentos normais de veículos com combustível sólido, o tempo de lançamento e o tempo de residência na primeira centena de metros são relativamente curtos. A nuvem de exaustão é, portanto, comprimida pelo gás aquecido emitido em um período da ordem de dez a quinze segundos. Experiências nos dados coletados pela NASA mostram que a ascensão da nuvem de exaustão nestas circunstâncias é calculada de forma mais adequada usando um modelo de ascensão de nuvem – também chamado de *cloud rise* – instantâneo. Porém, para o caso de lançamento abortado ou com explosão a melhor opção é o modelo contínuo de ascensão da pluma – conhecido como *plume rise*.

A nuvem de exaustão, uma vez estabilizada, pode ultrapassar a altura da camada limite atmosférica. Neste caso, para o cômputo da concentração, são consideradas duas regiões distintas: a primeira, delimitada na parte inferior pela superfície terrestre, e na parte superior pela camada limite atmosférica; e a segunda, se estendendo da camada limite atmosférica até uma altura limite de 3.000 m. Os poluentes são assumidos não penetrarem na região acima da segunda (acima de 3.000 m) e abaixo da primeira (abaixo da superfície terrestre). Assume-se que os gases advindos da segunda região não penetram em sua base (ou topo da camada limite atmosférica), contudo, para partículas, é assumido que sempre ocorre penetração.

4.3.1.1 Ascensão da Nuvem Instantânea (*cloud rise*)

O tempo para a nuvem de exaustão produzida pelo lançamento normal alcançar a altura z_k na atmosfera é (Bjorklund et al., 1982):

$$t_i = s^{-0.5} \arccos \left[1 - \left(\frac{s \gamma_x \gamma_y \gamma_z z_k^4}{4F_i} \right) \right] \quad (64)$$

onde t_i é menor que o tempo de estabilização t^* :

$$t^* = \pi s^{-0.5} \quad (65)$$

sendo s o parâmetro de estabilidade dado por:

$$s = \frac{g}{\theta} \frac{\Delta\theta}{\Delta z} \quad (66)$$

onde:

$\frac{\Delta\theta}{\Delta z}$: gradiente vertical de temperatura virtual potencial (K/m);

$\sigma \approx -0,0098 K/m$: taxa de lapso adiabático seco;

$\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$: coeficientes de entranhamento longitudinal, transversal e vertical, respectivamente.

Neste trabalho, o gradiente vertical de temperatura virtual potencial será obtido por um cálculo mais preciso que utiliza as variáveis meteorológicas disponibilizadas pelo modelo meteorológico WRF (Jacobson, 2005). Para isso, primeiramente se calcula a temperatura virtual T_v :

$$T_v = T \left(1 + 0,622 \frac{q_v}{1 + q_v} \right) \quad (67)$$

onde q_v é a razão de mistura de vapor d'água.

Em seguida, é calculada a temperatura virtual potencial θ :

$$\theta \approx T_v + \frac{g}{c_p} \quad (68)$$

sendo:

$g = 9,8 m/s^2$: aceleração da gravidade;

$c_p = 1,004832 J/gK$: calor específico do ar a pressão constante;

O termo de empuxo térmico para nuvem instantânea $F_i (m^4/s^2)$ é dado por:

$$F_i = \frac{3gHQ_t}{4\pi\rho_c T} \quad (69)$$

onde:

H : calor efetivo contido no combustível (J/g)

Q : taxa de emissão (g/s)

T : temperatura do ar ambiente (K)

ρ : densidade do ar (g/m^3)

O tempo t_s para o foguete alcançar a altura de estabilização z_i é dado por:

$$t_s = az_i^b \quad (70)$$

onde a e b são constantes que assumem os valores 0,181 e 0,6196, respectivamente (Bjorklund et al., 1982).

Por fim, a altura de estabilização z_i para uma atmosfera estável é dada por:

$$z_i = \left(\frac{8F_i}{\gamma_x \gamma_y \gamma_z s} \right)^{1/4} \quad (71)$$

As constantes γ_x , γ_y e γ_z assumem o valor de 0,64 em todas as direções (Bjorklund et al., 1982).

Outras melhorias feitas neste trabalho se referem ao cálculo do gradiente vertical de temperatura virtual potencial e da altura de estabilização z_i . De acordo com as fórmulas acima descritas, as grandezas z_i , t_s e a altura de cada nível z estão inter-relacionadas. Logo, a altura

final de estabilização z_i precisa ser encontrada iterativamente. O processo iterativo começa assumindo que z_i se encontra no primeiro nível vertical acima da superfície ($z_1 < z_i \leq z_2$). Assim, tem-se (Bjorklund et al., 1982):

$$\frac{\Delta\theta}{\Delta z} = \frac{\theta_2 - \theta_1}{z_2 - z_1} \quad (72)$$

Com isso, z_i é calculada e, se z_i exceder a altura z_2 , o processo avança para o próximo nível k estimando o gradiente vertical de temperatura virtual potencial utilizando uma aproximação por quadrados mínimos para os k -ésimos níveis, como segue (Bjorklund et al., 1982):

$$\frac{\Delta\theta}{\Delta z} = \frac{\sum_{i=1}^k \left\{ \left[z_i - \sum_{i=1}^k \frac{z_i}{k} \right] \left[\theta_i - \sum_{i=1}^k \frac{\theta_i}{k} \right] \right\}}{\sum_{i=1}^k \left[z_i - \sum_{i=1}^k \frac{z_i}{k} \right]^2} \quad (73)$$

Tendo em vista que $z_i < 3000$ m, o modelo encontra um valor de z_i dentro do intervalo $z_{k-1} \leq z_i \leq z_k$. Neste ponto é assumido que o gradiente vertical de temperatura virtual potencial na camada z_k é linear e a interpola linearmente, a fim de determinar z_i .

No caso de atmosfera convectiva ou neutra, z_i é calculada de forma um pouco diferente. (Bjorklund et al., 1998):

$$z_i = \left(\frac{2F_i x_m^2}{\gamma_x \gamma_y \gamma_z u^2} \right)^{1/4} \quad (74)$$

onde:

u : a velocidade do vento na altura de estabilização;

x_m : a distância máxima para a elevação da pluma na direção do vento, dado por:

$$x_m = \begin{cases} 12F_i^{1/2}u^{1/3}; F_i \leq 300u^{2/3} \\ 50F_i^{1/4}u^{1/2}; F_i > 300u^{2/3} \end{cases} \quad (75)$$

4.3.1.2 Ascensão da Pluma Contínua (*plume rise*)

No caso de lançamento abortado ou explosão, o tempo para uma pluma contínua alcançar a altura z_k é dado por:

$$t_k = s^{-0.5} \arccos \left[1 - \left(\frac{su\gamma_x\gamma_y z_k^3}{3F_c} \right) \right] \quad (76)$$

onde t_k é menor que t^* . O termo F_c (m^4/s^2), que é o termo de empuxo térmico da pluma contínua, é dado por:

$$F_c = \frac{gHQ}{\pi\rho c_p T} \quad (77)$$

Assim, a altura de estabilização da pluma contínua z_c é dada por:

$$z_c = \left(\frac{6F_c}{u\gamma_x\gamma_y s^{1/2}} \right)^{1/3} \quad (78)$$

As constantes γ_x e γ_y assumem o valor de 0,5, cada (Bjorklund et al., 1982). Os demais métodos para cálculo iterativo de z_i também são aplicados a z_c .

4.3.2 Dimensões da Nuvem (Termo Fonte)

Os raios longitudinal r_x , transversal r_y e vertical r_z da nuvem no tempo de estabilização t^* são dados pelas relações:

$$\begin{cases} r_x = \gamma_x z_{i,c} \\ r_y = \gamma_y z_{i,c} \\ r_z = \gamma_z z_{i,c} \end{cases} \quad (79)$$

Para o caso de lançamento normal, é assumida a hipótese de a nuvem ter o formato esférico. Considerando os valores de γ_x , γ_y e γ_z constantes e iguais a 0,64, tem-se que $r_x = r_y = r_z$. Assim, o raio de cada partição da nuvem:

$$r_e = \left(r_x^2 - |\Delta z_n - z_i|^2 \right)^{1/2} \quad (80)$$

onde Δz_n é a altura da enésima partição da nuvem.

Para o caso de lançamento abortado, é assumida a hipótese de a nuvem ter o formato cilíndrico. Logo, o raio de cada partição da nuvem é o próprio raio da nuvem cilíndrica, dado por:

$$r_c = \gamma_x z_c \quad (81)$$

onde $\gamma_x = 0,5$ (Bjorklund et al., 1982).

4.3.3 Distribuição de Material

Para o caso de lançamento normal, em que a nuvem é assumida como tendo formato esférico, a esfera é dividida em várias subcamadas ou partições onde cada uma delas é aproximada por um cilindro com altura Δz e volume dado por:

$$V_c = \pi r_e^2 \Delta z \quad (82)$$

Desta forma, a taxa de emissão em cada partição da nuvem é dada por:

$$Q_k = \frac{V_c}{V_e} Q \quad (83)$$

onde Q é a taxa de liberação ou emissão do foguete, e V_e é o volume total da esfera, que é dado por:

$$V_e = \frac{4}{3} \pi r_x^3 \quad (84)$$

Para um lançamento abortado ou explosão, o formato que a nuvem assume é o de um cilindro. Deste modo, o volume em cada partição é:

$$V_c = \pi r_c^2 \Delta z \quad (85)$$

e a taxa de emissão:

$$Q_k = \frac{V_c}{V_{tc}} Q \quad (86)$$

onde V_{tc} é o volume total do cilindro dado por:

$$V_{tc} = \pi r_c^2 h_{tc} \quad (87)$$

onde $h_{tc} = 2r_c$, que é a altura do cilindro que representa a nuvem para o caso de lançamento abortado ou explosão.

4.3.4 Distribuição Espacial da Nuvem

A posição espacial da nuvem na direção do vento em uma determinada camada k no tempo de estabilização t^* , com relação à origem da plataforma de lançamento, é dada pela seguinte relação (Moreira et al., 2010a):

$$x_k = x + u_k t^* \quad (88)$$

onde x é a posição longitudinal do local de lançamento e u_k é a velocidade do vento na k -ésima camada. Essa posição x_k é utilizada para determinar o deslocamento na direção longitudinal do escoamento até a estabilização da nuvem, sendo a partir desse ponto que ocorre o cálculo do transporte e dispersão da nuvem.

4.4 INCORPORAR NOVAS PARAMETRIZAÇÕES DE TURBULÊNCIA ATMOSFÉRICA

A princípio, a difusão de uma nuvem pode ser simulada matematicamente. O problema de simular a dispersão de um poluente liberado na atmosfera se torna primariamente a determinação do coeficiente de difusão apropriado. Geralmente, este problema tem sido tratado através da definição de classes de condições meteorológicas, tais como “estável”, “neutra” e “instável”, e do estabelecimento de medidas empíricas do coeficiente de difusão turbulenta para cada condição. Contudo, caso haja medições meteorológicas adequadas, essas medidas empíricas podem ser relacionadas a características mais detalhadas da atmosfera.

Na resolução de problemas de difusão atmosférica, a escolha de uma parametrização de turbulência representa um aspecto fundamental para a modelagem da dispersão de poluentes. A acurácia de cada modelo depende fortemente da maneira com que os parâmetros turbulentos são calculados e está relacionada à atual compreensão da camada limite atmosférica (Mangia et al., 2002).

Uma vez que a solução proposta da equação de difusão-advecção é tridimensional, é necessário supri-la com os coeficientes de difusão horizontal K_x , lateral K_y e vertical K_z . Eles podem ser formulados conforme Degrazia et al. (2000) nas seguintes condições atmosféricas:

a) Convectiva ou Instável:

$$K_x = 0,14 \sqrt{\frac{1}{2} (2\pi\kappa)^{-2/3}} z w_* \frac{\left(\frac{0,01h}{-L}\right)^{1/2} \left(\frac{0,65z}{h}\right)^{1/3}}{\left(\frac{z}{1,5h}\right)^{4/3}} \quad (89)$$

$$K_y = 0,14 \sqrt{\frac{2}{3} (2\pi\kappa)^{-2/3}} z w_* \frac{\left(\frac{0,01h}{-L}\right)^{1/2} \left(\frac{0,65z}{h}\right)^{1/3}}{\left(\frac{z}{1,5h}\right)^{4/3}} \quad (90)$$

$$K_z = 0,16 w_* h \left(0,01 \frac{h}{-L}\right)^{1/2} \left[1 - \exp\left(-4 \frac{z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(8 \frac{z}{h}\right)\right]^{4/3} \quad (91)$$

b) Estável:

$$K_x = \frac{u_* \left[1,25 \left(1 + \frac{3,7z}{L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1,25}} \right) \right]^{1/3}}{\left[0,045 \left(1 + 116,67 \frac{f_c z}{u_*} + \frac{3,7z}{L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1,25}} \right) \right]^{4/3}} \quad (92)$$

$$K_y = \frac{u_* \left[1,25 \left(1 + \frac{3,7z}{L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1,25}} \right) \right]^{\frac{1}{3}}}{\left[0,16 \left(1 + 32,82 \frac{f_c z}{u_*} + \frac{3,7z}{L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1,25}} \right) \right]^{\frac{4}{3}}} \quad (93)$$

$$K_z = 0,11 u_* L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^2 \quad (94)$$

c) Neutra:

$$K_x = \frac{u_* \left[1,25 \left(1 + \frac{3,7z}{L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1,7}} \right) \right]^{\frac{1}{3}}}{\left[0,045 \left(1 + 116,67 \frac{f_c z}{u_*} + \frac{3,7z}{L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1,7}} \right) \right]^{\frac{4}{3}}} \quad (95)$$

$$K_y = \frac{u_* \left[1,25 \left(1 + \frac{3,7z}{L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1,7}} \right) \right]^{\frac{1}{3}}}{\left[0,16 \left(1 + 32,82 \frac{f_c z}{u_*} + \frac{3,7z}{L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1,7}} \right) \right]^{\frac{4}{3}}} \quad (96)$$

$$K_z = \left(\frac{0,4 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{0,85} u_* z}{\left[1 + 15 \frac{f_c z}{u_*}\right]^{4/3}} \right) \quad (97)$$

onde w_* é a velocidade convectiva, κ é a constante de von Karman, h é a altura da camada limite atmosférica, L é o comprimento de Monin-Obukhov, z é a altura para cálculo do parâmetro de turbulência, u_* é a velocidade de fricção e f_c é o parâmetro de Coriolis. Deste modo, outra importante melhoria desenvolvida no modelo MSRED, em comparação com o seu antecessor (o modelo MSDEF), é a incorporação dessas novas parametrizações de turbulência atmosférica, necessárias à solução tridimensional semi-analítica da equação de difusão-advecção apresentada neste trabalho.

4.5 INTEGRAR O MSRED COM O CMAQ PARA O TRANSPORTE QUÍMICO DE LONGO ALCANCE

O MSRED, como modelo de curto alcance, é responsável por simular a formação e dispersão da nuvem de poluentes derivados dos produtos de exaustão de foguetes em escalas de tempo e de espaço da ordem de minutos e de centenas de metros a poucos quilômetros, respectivamente. Essa característica está ligada à hipótese de transporte em linha reta usada no modelo durante o movimento da nuvem e após na fase de dispersão, em que se ignora a possibilidade de campos de vento complexos que possam surgir devido a terrenos com relevo mais acidentado ou que possam evoluir durante a atuação de algum fenômeno meteorológico de maior escala, como a passagem de uma brisa do mar ou frente fria. Sendo assim, o modelo assume a hipótese de atmosfera estacionária, o que não é um problema para simulações de curto alcance em distâncias de aproximadamente 20 km.

Uma vez que lançamentos de foguetes liberam grandes quantidades de poluentes em um curto intervalo de tempo, e considerando que a nuvem de exaustão, uma vez estabilizada, pode alcançar uma altura na ordem de algumas centenas de metros, é possível que haja impacto na qualidade do ar sobre pontos receptores a distâncias maiores que 20 km. Para escalas de tempo e espaço maiores, a hipótese de atmosfera estacionária já não pode ser considerada, sendo necessária assim a utilização de técnicas de modelagem mais robustas e adequadas a esta escala de tempo e espaço.

Assim posto, o modelo CMAQ se encarrega pela modelagem do transporte químico. Portanto, a fim de fornecer ao modelo CMAQ o campo de concentração inicial de poluentes, o MSRED é inicialmente executado para gera-lo, produzindo o arquivo de condições iniciais para modelagem no CMAQ, substituindo o aplicativo ICON, que é o responsável pela geração do arquivo de condições iniciais do modelo. Os detalhes do projeto e da implementação dessa solução estão descritos na Seção 4.2.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo serão apresentados os resultados do trabalho desenvolvido, visando o alcance dos objetivos traçados.

5.1 PRIMEIROS ESFORÇOS – MODELAGEM COM WRF, SMOKE e CMAQ

Nascimento et al. (2014) apresentam o primeiro esforço já realizado para representação de nuvens de exaustão devido a lançamento de foguetes utilizando o sistema de modelagem CMAQ, sem a utilização de nenhum outro modelo para fornecer as entradas para o CMAQ. Os trabalhos apresentados em conferências internacionais por Nascimento et al. (2013a, 2013b) serviram de base para o desenvolvimento desta tese.

5.2 MODELAGEM COM WRF-LES

Esta seção tem como fim apresentar os trabalhos que foram realizados com o intuito de avaliar o pré-processamento de meteorologia a partir da aplicação do modelo WRF com a opção LES ativada para casos reais, para a entrada no modelo MSDEF para a avaliação da dispersão de nuvens de exaustão de foguetes.

Nascimento et al. (2015a, 2015b, 2015c) desenvolveram um trabalho focado em aplicar o WRF-LES para geração dos dados meteorológicos de entrada ao modelo MSDEF. Para isso, foi realizado todo um trabalho para preparação de dados de relevo de altíssima resolução (cerca de 100m ou 3'' de grau, adquiridos a partir do sítio do USGS – *United States Geological Survey*) para entrada no WRF a fim de executá-lo em modo LES para casos reais, utilizando o resultado da modelagem meteorológica como entrada no modelo MSDEF. Este é o primeiro esforço realizado com foco em simulações da turbulência atmosférica integrando o modelo WRF para geração de dados meteorológicos de entrada para o modelo MSDEF.

O estudo de caso se refere a uma simulação de 4 dias, de 18 a 22 de Março de 2013, utilizando o modelo WRF versão 3.5 para geração de dados meteorológicos, com dados de GFS como entrada. Os domínios foram configurados com 5 domínios, com resolução horizontal de 8,1 km, 2,7 km, 900 m, 300 m e 100 m para os domínios de 1 a 5, respectivamente, com 70 níveis verticais. A Figura 14 apresenta a localização e distribuição dos domínios, sendo que o domínio 5, o mais fino, é tão pequeno em relação aos demais que sua localização está sinalizada apenas pelo número 5. A Figura 15 mostra dois cenários de

campos de ventos de superfície extraído dessa modelagem para os domínios 3 e 5, com sua localização no mapa, evidenciando o quão pequeno é o domínio 5 em relação aos demais.



Figura 14: Localização e distribuição dos domínios configurados na modelagem com WRF-LES. Cada domínio é representado por um retângulo, sendo o domínio 1 o mais externo, o domínio o imediatamente interno, e assim por diante.



Figura 15: Cenários de campos de ventos de superfície para os domínios 3 e 5, sendo o menor referente ao domínio 5.

Um dos principais desafios que foram encontrados para a execução do modelo WRF em modo LES para casos reais foi a aquisição e configuração de um novo e completo conjunto de dados de relevo para a região do CLA com altíssima resolução, visto que, atualmente, a melhor resolução de relevo disponível no WRF é de 1 km (30'' de grau), a qual não é adequada para simulações de grandes turbilhões. Destarte, a partir do sítio do órgão

americano de geofísica, o USGS, foram baixados dados de relevo em formato GeoTIFF na resolução de 3'' de grau, aproximadamente 92,5 m, para a região de Alcântara. Então, esses dados foram processados, se tornando um novo conjunto de dados de relevo no formato de entrada do pré-processador de terreno do WRF, o programa *geogrid*, permitindo assim a modelagem no WRF com relevo de altíssima resolução.

A Figura 16 apresenta dois cenários de campos de ventos na superfície simulados pelo modelo WRF, referentes aos dias 19 de Março de 2013 às 16:00h GMT e 20 de Março de 2013 às 11:00h GMT, para o domínio 5. É possível notar que o vento está predominantemente na direção NE, fluindo para o interior do continente, numa região pouco habitada. Assim, um possível lançamento de foguete neste momento não impactaria em regiões mais densamente povoadas, como a capital do estado do Maranhão, São Luís. Algumas horas depois o cenário muda: a direção do vento começa a mudar, e, no dia seguinte às 11:00h GMT, 19 horas após, o campo de vento muda, fluindo predominantemente da direção sul/sudeste, mostrando que em poucas horas a direção do vento pode mudar consideravelmente. Esse comportamento, entretanto, é anômalo quando se considera o padrão de vento da região. Gisler et al. (2011) estudou para o mês de março o comportamento do vento, mostrando, através da análise da rosa dos ventos, que há maior predominância nas direções NE (com 33%), seguido de NNE (18%) e ENE (13%).

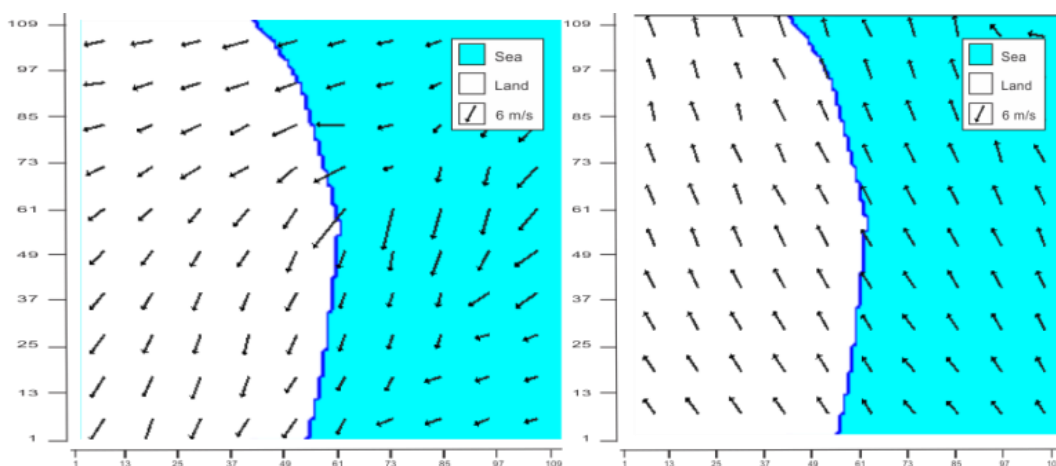


Figura 16: Campos de vento simulados para 19 de Março de 2013 às 16:00h (à esquerda), e 20 de Março de 2013 às 11:00h (à direita), para o domínio 5 (Nascimento et al., 2015a).

Os parâmetros direção e velocidade do vento, obtidos da saída do WRF-LES, são apresentados na Figura 17. Esses valores correspondem à altura de 10m. É possível notar que, na medida em que o vento flui do oceano ao continente, sua velocidade decresce de 4 a 6 m/s para 2 a 4 m/s. Isso se deve à súbita mudança na rugosidade da superfície que ocorre na linha costeira: enquanto que ela é menor próxima à superfície do oceano, ela aumenta abruptamente

quando encontra o continente devido às falésias, levando à diminuição da velocidade do vento próximo à superfície continental. A direção do vento prevalece nas direções leste e nordeste, sendo um comportamento comum na linha costeira do estado do Maranhão, Brasil (Fisch, 1999), o que é devido à presença dos ventos alísios durante a estação chuvosa que se estende de Janeiro a Julho, sendo mais representativos durante os meses de Março e Abril.

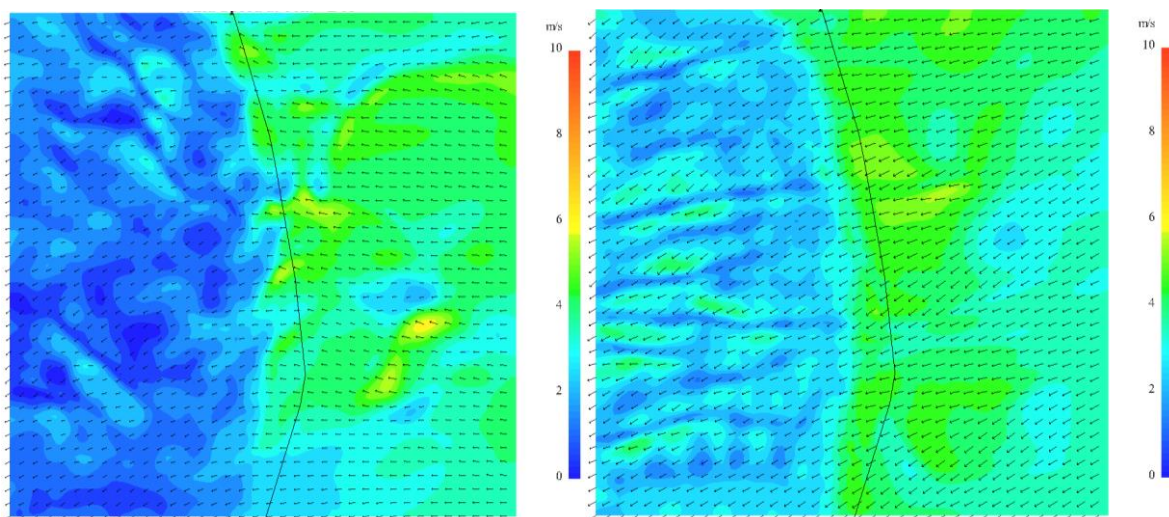


Figura 17: Cenário de direção e velocidade do vento para a região do CLA, para os dias 20 e 21 de março de 2013, respectivamente, gerado pelo WRF-LES (Nascimento et al., 2015b).

Figura 18 apresenta o cenário do parâmetro temperatura a 2m. Como se pode notar, a temperatura tem maior variação na interseção entre oceano e continente, sendo maior na superfície continental do que na oceânica. Apesar de essa variação ocorrer, sua amplitude não é tão grande, o que também é uma característica dessa região para o período do mês de Março (Fisch, 1999).

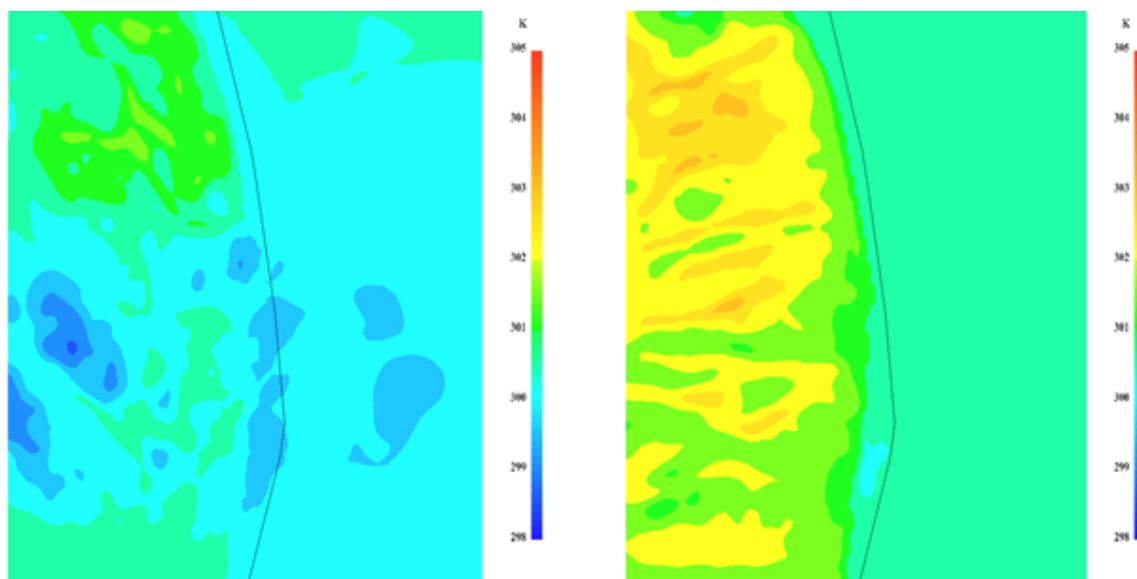


Figura 18: Cenário de temperatura do ar a 2m na região do CLA para os dias 20 e 21 de março de 2013, respectivamente, gerado pelo WRF-LES (Nascimento et al., 2015b)..

Análises foram também realizadas a fim de comparar os resultados da modelagem meteorológica utilizando o WRF-LES com dados coletados de radiossondagem na região do CLA utilizando o equipamento Apparatus. A Figura 19 mostra essa comparação para o parâmetro velocidade do vento para os quatro dias da simulação. Em geral, nota-se que o modelo mostrou o mesmo comportamento dos dados coletados pela radiossonda, contudo com certa variação no comportamento dos dados de radiossondagem com respeito aos dias 18 e 19, o que possivelmente deve ser devido à grande sensibilidade do equipamento e às rajadas de ventos que podem ocorrer em alturas mais altas na atmosfera. Para os dias 20 e 21, não houve variações maiores no comportamento, mostrando maior concordância entre os dados modelados e os dados observacionais, aspecto este que pode ser percebido de um modo geral.

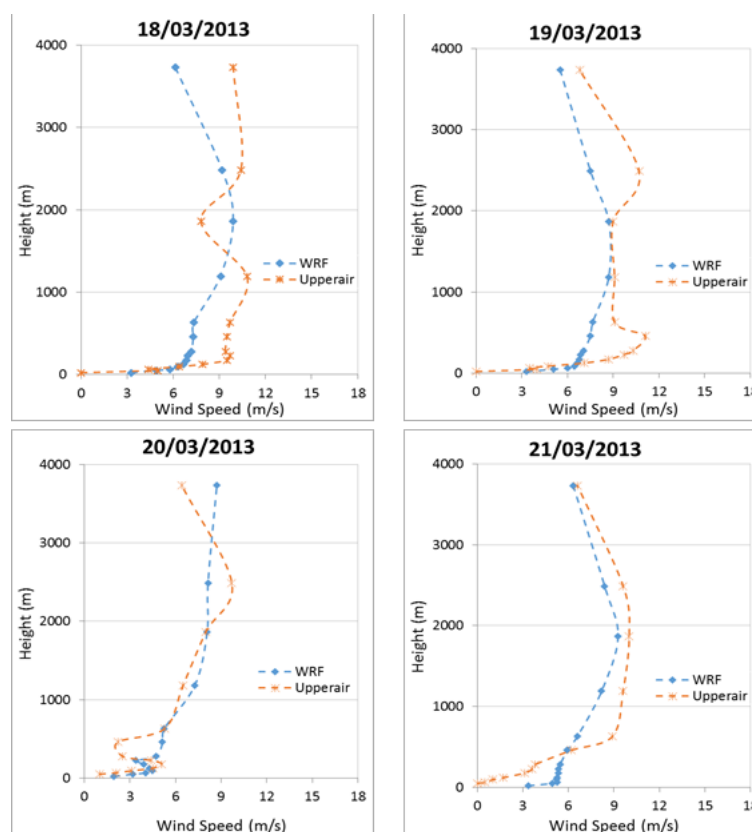


Figura 19: Comportamento do parâmetro velocidade do vento em diferentes alturas, comparando os resultados do modelo WRF-LES com os dados de radiossondagem coletados no CLA (Nascimento et al., 2015b).

O parâmetro direção do vento, cujo comportamento e comparação com dados observacionais são mostrados na Figura 20, apresentou maior incidência nas direções Leste e Nordeste. Os valores encontrados na saída do modelo se mostraram bem próximos aos que foram medidos através da radiossondagem para os quatro dias considerados, sendo ainda mais notável sua equivalência para os dias 19 e 20. A Figura 21, por sua vez, mostra a comparação

entre o resultado da modelagem com WRF-LES e os dados de radiossondagem para o parâmetro temperatura do ar em função da altura.

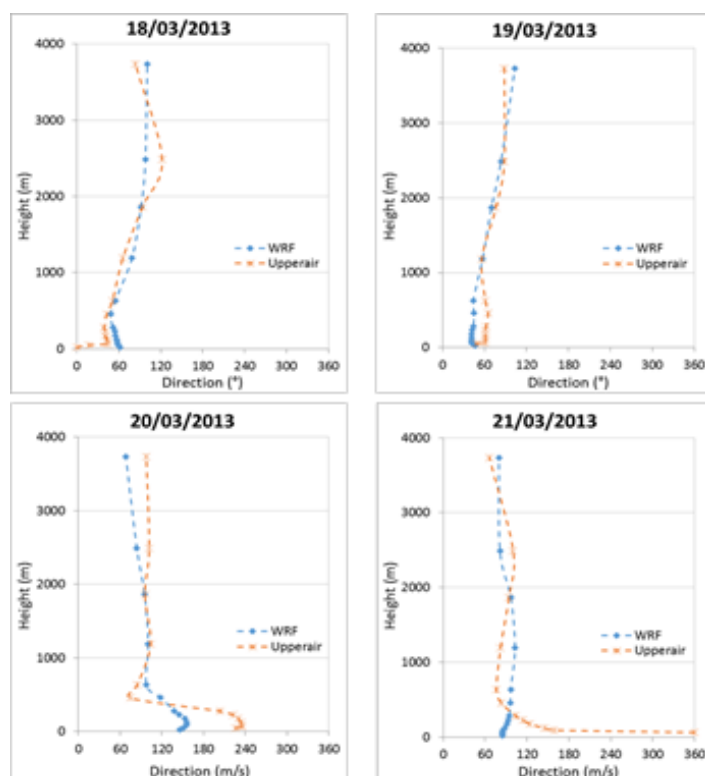


Figura 20: Comparação do comportamento de dados de modelagem WRF-LES com dados de radiossondagem para o parâmetro direção do vento (Nascimento et al., 2015b).

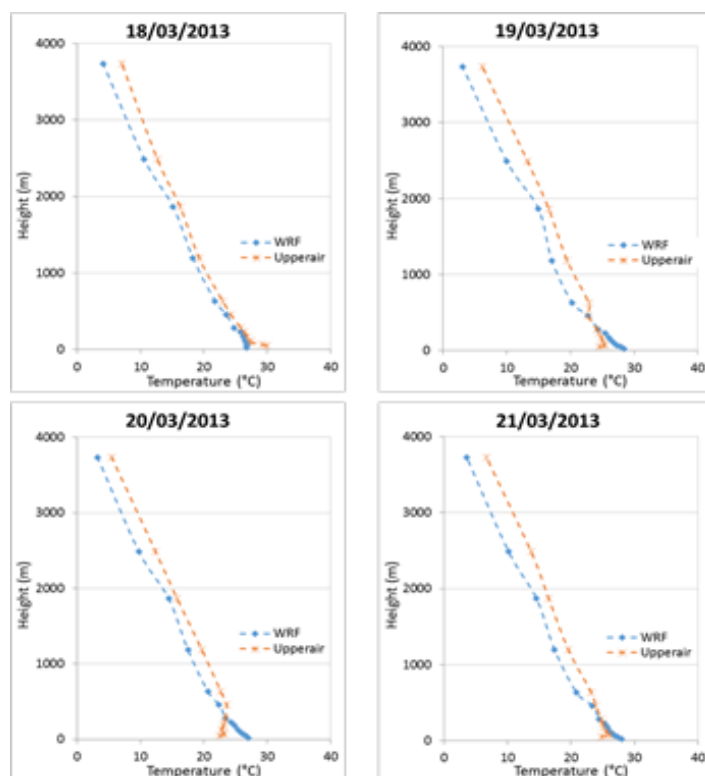


Figura 21: Comparação do comportamento de dados de modelagem WRF-LES com dados de radiossondagem para o parâmetro temperatura do ar (Nascimento et al., 2015b).

Observa-se que o modelo apresentou resultados cujo comportamento é bem próximo aos dados coletados pela radiossonda, porém com alguma dificuldade quando próximo à superfície. Isso pode ser devido ao fato de que o modelo pode não estar considerando adequadamente o efeito das falésias sobre os parâmetros micrometeorológicos, visto que o CLA fica bem próximo à linha costeira, contudo sobre o platô formado pelas falésias.

A fim de avaliar estatisticamente os dados simulados pelo WRF-LES, foi aplicada a metodologia desenvolvida por Emery et al. (2001), que se baseia na utilização de valores de referência para a avaliação da qualidade de dados modelados. De acordo com US EPA (2007), valores de referência (*benchmark*, em inglês) não devem ser utilizados para determinar se uma simulação foi bem sucedida ou não, mas sim para avaliar como os dados estão se comportando e se análises adicionais na simulação ou na parametrização são requeridos. A Tabela 9 mostra os resultados das análises estatísticas e suas comparações com os valores de referência para os parâmetros temperatura do ar, velocidade e direção do vento para cada dia do caso simulado.

Tabela 9: Avaliação estatística com base em valores de referência para os parâmetros meteorológicos temperatura do ar, direção e velocidade do vento, produzidos pelo modelo WRF-LES (Nascimento et al., 2015b).

Variável	Estatística	Referência	18/03/2013	19/03/2013	20/03/2013	21/03/2013
Temperatura do ar	MB (K)	$\leq \pm 0,50$	-3,29	-2,48	-2,11	-2,54
	MAGE (K)	$\leq 2,00$	3,29	3,56	3,65	3,11
	IOA	$\geq 0,80$	1,00	1,00	3,65	3,11
Velocidade do Vento	MB (m.s^{-1})	$\leq \pm 0,50$	-1,39	-1,23	0,62	0,68
	RMSE (m.s^{-1})	$\leq 2,00$	2,74	2,86	2,34	2,41
Direção do Vento	MB ($^{\circ}$)	$\leq \pm 10,00$	2,98	1,89	-24,44	6,57
	MAGE ($^{\circ}$)	$\leq 30,00$	23,59	31,87	44,04	47,11

De acordo com os índices estatísticos apresentados e seus respectivos valores de referência, é possível notar que, dentre todos os parâmetros, a direção do vento obteve melhor aderência aos limites propostos por Emery et al. (2001), considerando que no dia 19 houve uma pequena extrapolação do índice MAGE, e no dia 20, do índice MB. Em se tratando dos demais parâmetros, estes não se apresentaram dentro dos limites dos valores de referência propostos. Também neste caso, como as falésias desempenham importante papel sobre os parâmetros micrometeorológicos na região do CLA, possivelmente sua influência não foi devidamente percebida pelo modelo WRF, impactando nos indicadores apresentados. Apesar disso, considerando todas as análises feitas, o modelo WRF com a abordagem LES aplicado a casos reais mostrou ser ferramenta capaz de gerar o campo tridimensional meteorológico necessário ao sistema de modelagem híbrido de avaliação operacional do impacto da nuvem

de exaustão de foguetes para lançamentos normais e abortados na região do CLA (mas não limitado a ela), nas atividades de planejamento de atividades de missões e avaliação ambiental, previsões pré-lançamentos dos efeitos ambientais de operações de lançamento e análise ambiental pós-lançamento.

5.3 MODELAGEM COM O MSRED

Nesta seção serão apresentados os resultados da modelagem da dispersão e do transporte químico de nuvens de exaustão de poluentes devido ao lançamento de foguetes em situações normais e abortadas, para diferentes condições de estabilidade atmosférica, utilizando o MSRED para a avaliação de curto alcance, e o CMAQ para a avaliação de longo alcance, evidenciando o atendimento aos objetivos deste trabalho. Inicialmente, será apresentada a análise de convergência numérica da solução semi-analítica tridimensional da equação de difusão-advecção, conforme a metodologia explicitada nesta tese. Em seguida, será feita uma análise da aplicação da metodologia desenvolvida no MSRED para o cálculo dos coeficientes de turbulência em função da altura, para diferentes condições de estabilidade atmosférica. Depois, serão apresentados os resultados das modelagens realizadas com o MSRED e seu acoplamento com os modelos WRF-LES e CMAQ para a geração de informações de meteorológicas como entrada e para a modelagem do transporte químico da nuvem de exaustão de foguetes, respectivamente. Por fim, serão apresentados os aspectos referentes à implementação das técnicas de processamento paralelo discutidas anteriormente, visando à avaliação de seu desempenho nas modelagens realizadas com o MSRED.

Para a execução e avaliação dos resultados das modelagens com MSRED acoplado com o CMAQ, foi utilizado o mesmo cenário de modelagem e as mesmas configurações de domínio descritas na Seção 5.2. Foram selecionados três cenários meteorológicos dentro do período modelado pelo WRF-LES que representassem as diferentes condições de estabilidade atmosférica, avaliando, para cada uma delas, o impacto de um lançamento hipotético de um foguete com as mesmas características do VLS (ver Tabela 3) em situação normal e abortada. Uma vez que não existem ainda disponíveis dados observacionais de concentrações de poluentes coletados no CLA em eventos de lançamentos de foguetes, serão feitas análises e avaliações qualitativas da aplicação do modelo MSRED e de seu acoplamento com o modelo CMAQ com base na literatura disponível. Apesar disso, o método ADMM, utilizado na modelagem matemática do MSRED, foi testado em diversos experimentos disponíveis na literatura, tais como Kinkaid (Moreira et al., 2004), Copenhagen (Moreira et al., 2005a;

2005c), Prairie Grass (Moreira et al., 2005d; 2006; 2014) e Hanford (Moreira et al., 2010c), o que gera confiabilidade a esta análise qualitativa.

Assim, a Tabela 10, cujos dados foram obtidos do relatório de execução do MSRED, apresenta as informações meteorológicas extraídas da modelagem com o WRF-LES, que caracterizaram cada cenário e sua respectiva condição de estabilidade atmosférica, onde o horário está expresso no horário de Greenwich, u_* representa a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Monin-Obukhov (m), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical (m/s), h é a altura da camada limite atmosférica (m), e u_{v10} e u_{d10} são, respectivamente, a velocidade (m/s) e a direção (°) do vento médio na camada de superfície (~10m), todos referentes à célula de grade (43,43) do domínio 3 (de resolução de 900m) onde se encontra o CLA. A configuração de domínios é a mesma apresentada anteriormente na Seção 5.2, tendo sido escolhido o domínio 3 para a execução das modelagens por ter o tamanho e a resolução suficientes para se avaliar o impacto do transporte químico de longo alcance da nuvem de exaustão nas vilas e cidades do entorno da região do CLA.

Tabela 10: Informações meteorológicas de cada cenário de modelagem.

Condição Atmosférica	Data e hora (GMT)	Data e hora local (GMT-3)	u_* (m/s)	L (m)	w_* (m/s)	h (m)	u_{v10} (m/s)	u_{d10} (°)
Estável	18/03/2013 09:00h	18/03/2013 06:00h	0,4	100,0	0,0	874,8	3,5	74,0
Instável	18/03/2013 16:00h	18/03/2013 13:00h	0,6	-30,3	2,5	773,5	2,9	62,8
Neutra	18/03/2013 22:00h	18/03/2013 19:00h	0,6	180,0	0,0	733,0	4,0	63,6

5.3.1 Análise da Convergência Numérica

Considerando os métodos numéricos, todas as derivadas na equação de difusão-advecção são aproximadas por um esquema de diferença finita, além da discretização do domínio em um conjunto de pontos discretos dispostos em grade, impondo um grande número de cálculos a cada passo de tempo a fim de realizar a integração temporal para todo o período considerado. Essa característica não aparece no método semi-analítico, posto que o caráter de sua solução permite o seu cômputo em qualquer tempo, garantindo assim um menor custo computacional e uma menor influência do erro de arredondamento na acurácia dos resultados, quando comparados com a abordagem numérica, que de fato realiza maior quantidade de operações matemáticas. E em contraste com as soluções analíticas, a solução semi-analítica tridimensional aqui apresentada não é limitada ao formato dos perfis do vento vertical e dos coeficientes de turbulência K , sendo possível utilizar perfis realísticos de ambos.

Os resultados obtidos pelo esquema de quadratura Gaussiana de ordem N são exatos quando a função transformada é um polinômio de grau $2N-1$. Outrossim, uma função contínua pode ser aproximada por um polinômio, com a propriedade de que uma melhor aproximação é alcançada com o aumento do grau do polinômio. Assim sendo, com o aumento da quantidade de pontos da quadratura Gaussiana que aparecem na solução, é esperado que os resultados numéricos convirjam para o resultado exato. Portanto, a fim de validar a solução proposta, e visto que ela utiliza um método numérico para inversão da Transformada de Laplace, é necessário verificar se ela converge com o aumento dos pontos da quadratura Gaussiana. Tendo como base o trabalho de Moreira et al. (2006), para este fim foram utilizados os dados do experimento 1 de Copenhagen descritos em Gryning et al. (1987) para entrada no modelo, e foram executados testes numéricos a fim de verificar a convergência da solução. Na Tabela 11, u_{vel} é a velocidade do vento médio (m/s), u_* representa a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Monin-Obukhov (m), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical (m/s) e h é a altura (m) da camada limite atmosférica.

Tabela 11: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen (Gryning, 1987).

Experimento	u_{vel} (m/s)	u_* (m/s)	L (m)	w_* (m/s)	h (m)
1	3,4	0,37	-46	1,8	1980
2	10,6	0,74	-384	1,8	1920
3	5,0	0,39	-108	1,3	1120
4	4,6	0,39	-173	0,7	390
5	6,7	0,46	-577	0,7	820
6	13,2	1,07	-569	2,0	1300
7	7,6	0,65	-136	2,2	1850
8	9,4	0,7	-72	2,2	810
9	10,5	0,77	-382	1,9	2090

Como a solução envolve duas inversões pelo esquema de quadratura Gaussiana nas dimensões x e t , mais o truncamento dos termos do somatório devido à aplicação da técnica GITT na variável y , foi necessário avaliar primeiramente a convergência da solução estacionária para $C(x,z)$, considerando somente a inversão pelo esquema de quadratura Gaussiana na variável x com a aplicação da técnica ADMM. A análise da convergência para a solução estacionária é apresentada nas Figuras 22 e 23, para $\Delta z = 10\text{m}$ e $\Delta z = 50\text{m}$, respectivamente.

As Figuras 24 e 25 apresentam, para $\Delta z = 10\text{m}$ e $\Delta z = 50\text{m}$, respectivamente, a análise gráfica da convergência da solução dependente do tempo para $C(t,x,z)$, considerando as inversões pelo esquema de quadratura Gaussiana nas dimensões t e x com a aplicação da

técnica ADMM. Nesta análise, foram fixados o tempo em $t = 600s$ e o número de pontos da quadratura Gaussiana na variável x em $M_2 = 2$, variando o número de pontos M_1 na variável t .

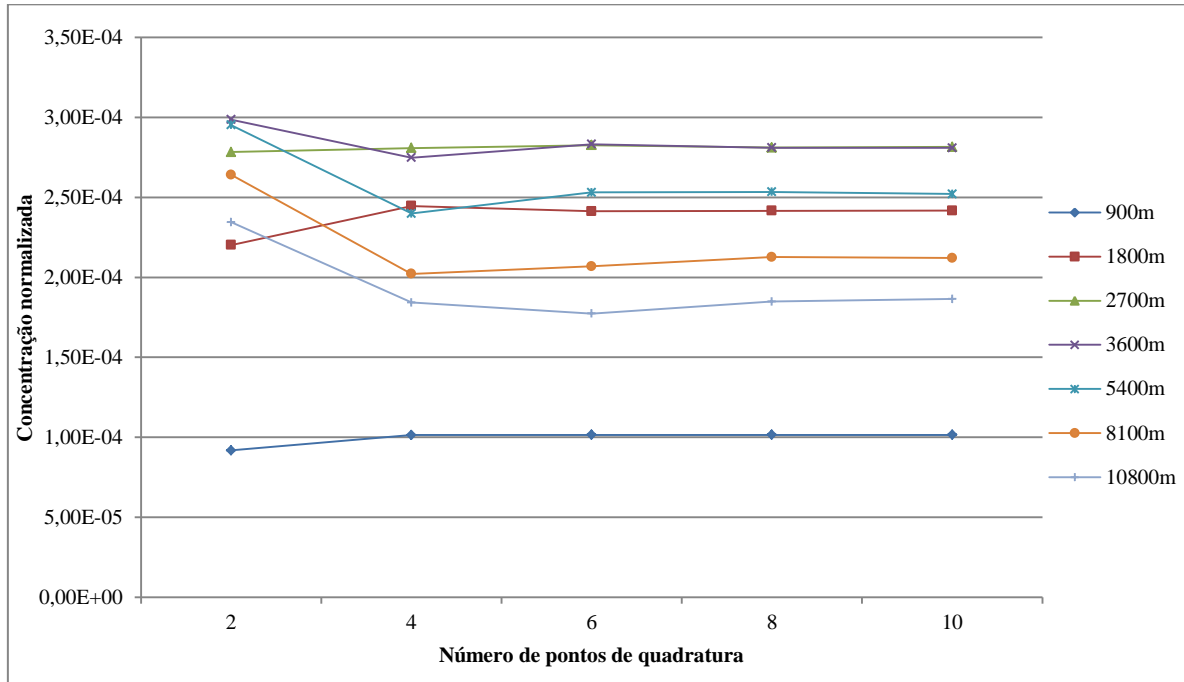


Figura 22: Convergência da solução estacionária da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(x,z)/Q$ referente à superfície em função do número de pontos de quadratura M_2 para diferentes distâncias com $\Delta z = 10m$.

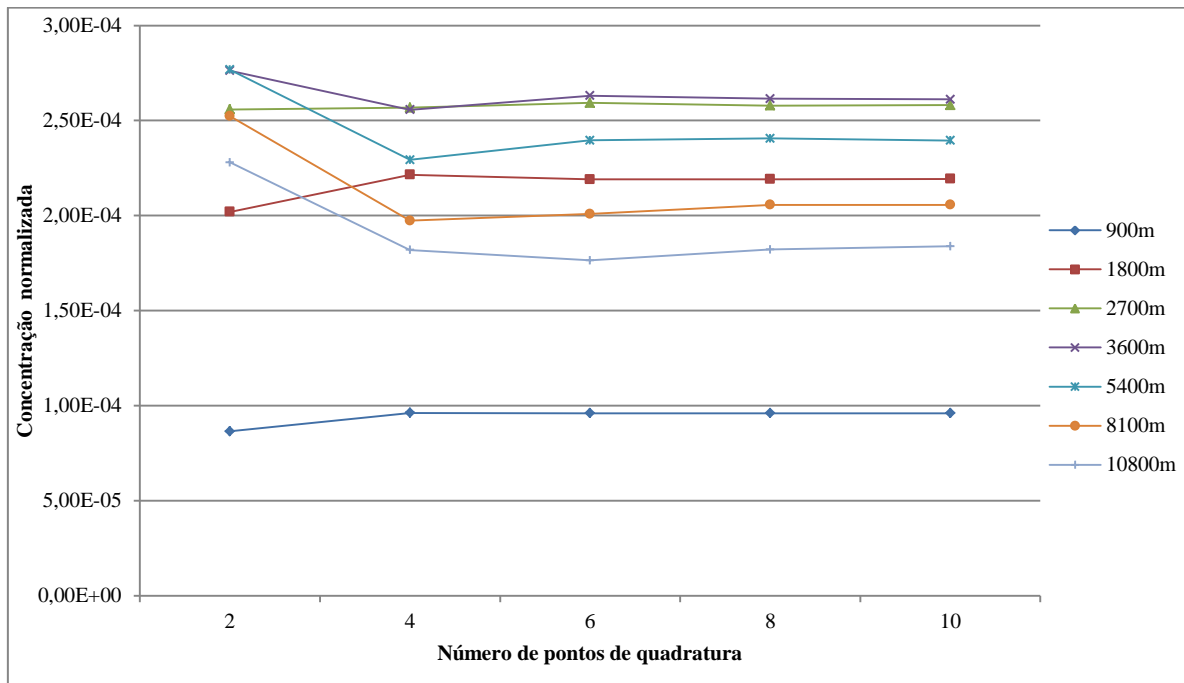


Figura 23: Convergência da solução bidimensional estacionária da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(x,z)/Q$ referente à superfície em função do número de pontos de quadratura M_2 para diferentes distâncias com $\Delta z = 50m$.

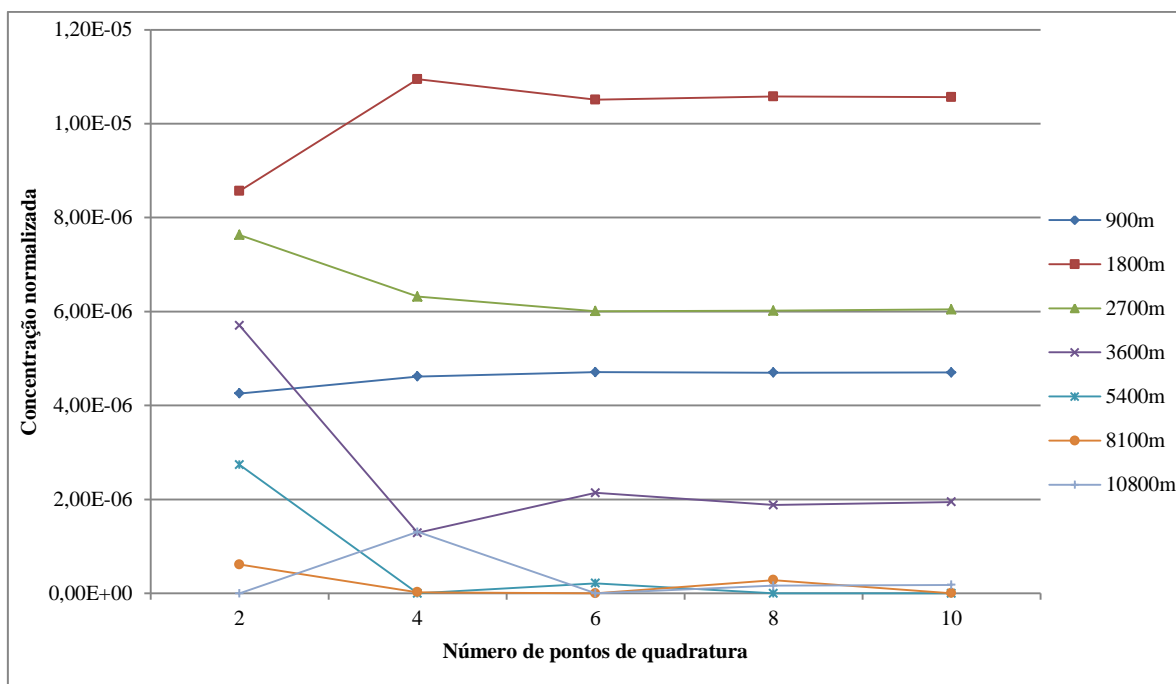


Figura 24: Convergência da solução dependente do tempo da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(t,x,z)/Q$ referente à superfície, em função do número de pontos de quadratura M_l para diferentes distâncias com $M_2 = 2$, $\Delta z = 10\text{m}$ e $t = 600\text{s}$.

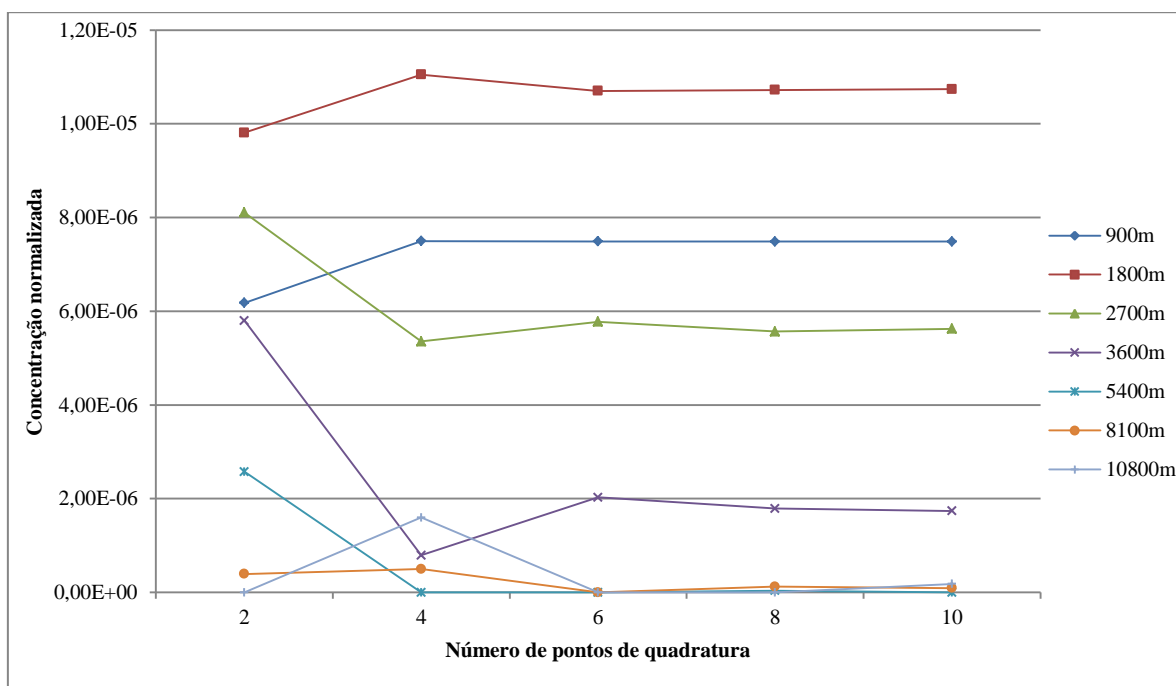


Figura 25: Convergência da solução bidimensional dependente do tempo da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(t,x,z)/Q$ referente à superfície em função do número de pontos de quadratura M_l para diferentes distâncias com $M_2 = 2$, $\Delta z = 50\text{m}$ e $t = 600\text{s}$.

A Figura 26, por sua vez, apresenta a análise gráfica da convergência da solução tridimensional dependente do tempo para $C(t,x,y,z)$, considerando as inversões pelo esquema de quadratura Gaussiana nas dimensões t e x com a aplicação da técnica ADMM, em conjunto com o truncamento dos termos do somatório devido à aplicação da técnica GITT na variável

y, variando o número de autovalores e fixando $\Delta z = 50\text{m}$, $t = 600\text{s}$, $x = 900\text{m}$, $y = 900\text{m}$, $M_1 = 2$ e $M_2 = 2$.

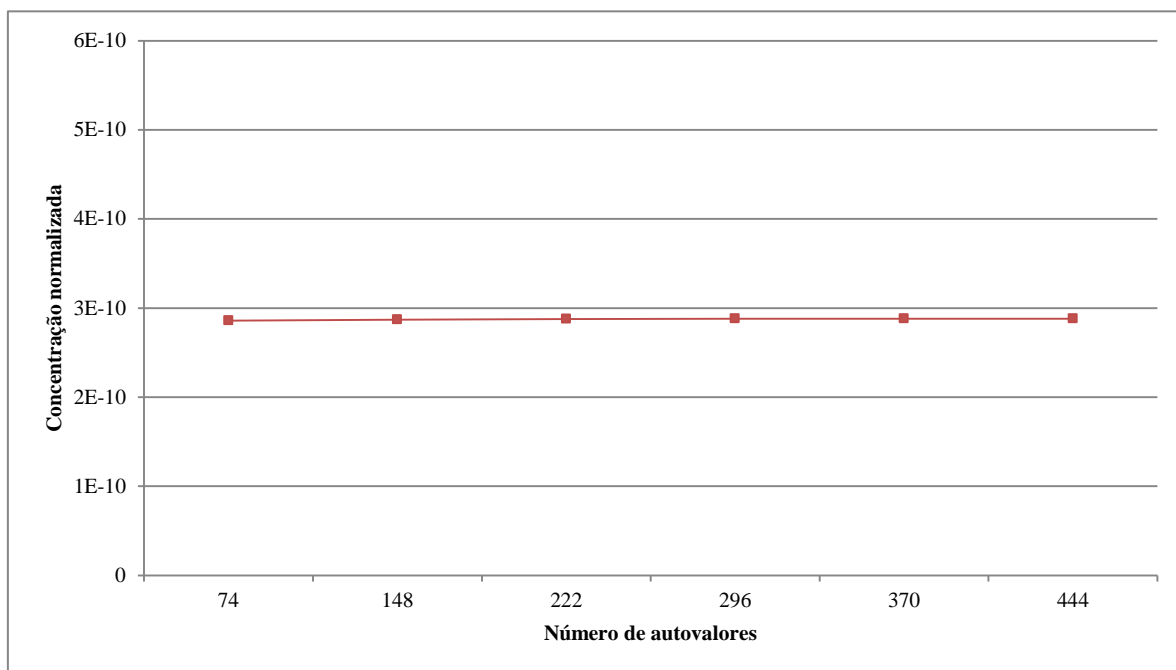


Figura 26: Convergência da solução tridimensional dependente do tempo da equação de difusão-advecção para a concentração normalizada $C(t,x,y,z)/Q$ referente à superfície em função do número de autovalores com $k = 2$, $m = 2$, $\Delta z = 50\text{m}$ e $t = 600\text{s}$.

Em comparação com o comportamento dos gráficos de convergência apresentados anteriormente, este converge quando se vai aumentando a quantidade de autovalores. Portanto, considerando os gráficos de convergência das soluções transientes unidimensional, bidimensional e tridimensional, verifica-se que a solução converge.

5.3.2 Análise dos Coeficientes de Turbulência Atmosférica

As Figuras 27, 28 e 29 apresentam os gráficos do perfil vertical dos coeficientes de turbulência K_x , K_y e K_z para atmosfera instável, estável e neutra, respectivamente. Nesta análise, a altura z foi normalizada pela altura da camada limite atmosférica (representada nos gráficos pelo termo z/h), tendo esta sido obtida da saída do modelo WRF. Cada caso de estabilidade atmosférica corresponde aos que estão apresentados na Tabela 10, que contém os parâmetros meteorológicos de cada cenário.

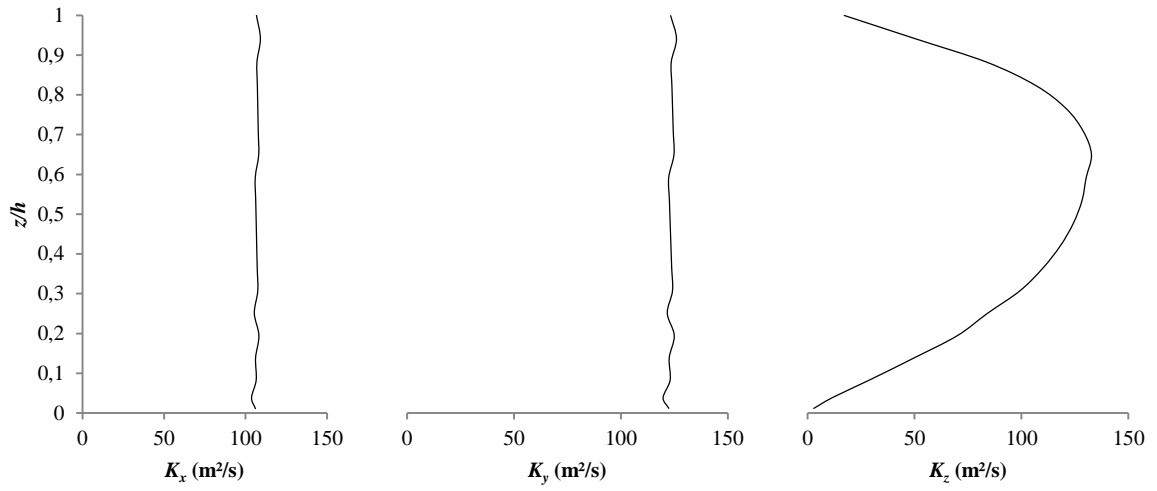


Figura 27: Perfil vertical dos coeficientes de turbulência K_x , K_y e K_z para atmosfera instável.

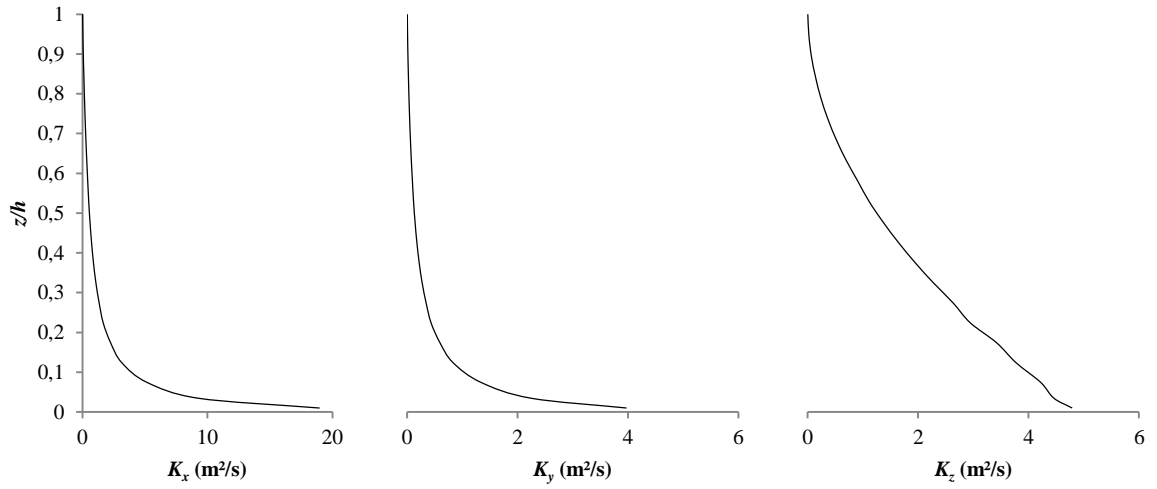


Figura 28: Perfil vertical dos coeficientes de turbulência K_x , K_y e K_z para atmosfera estável.

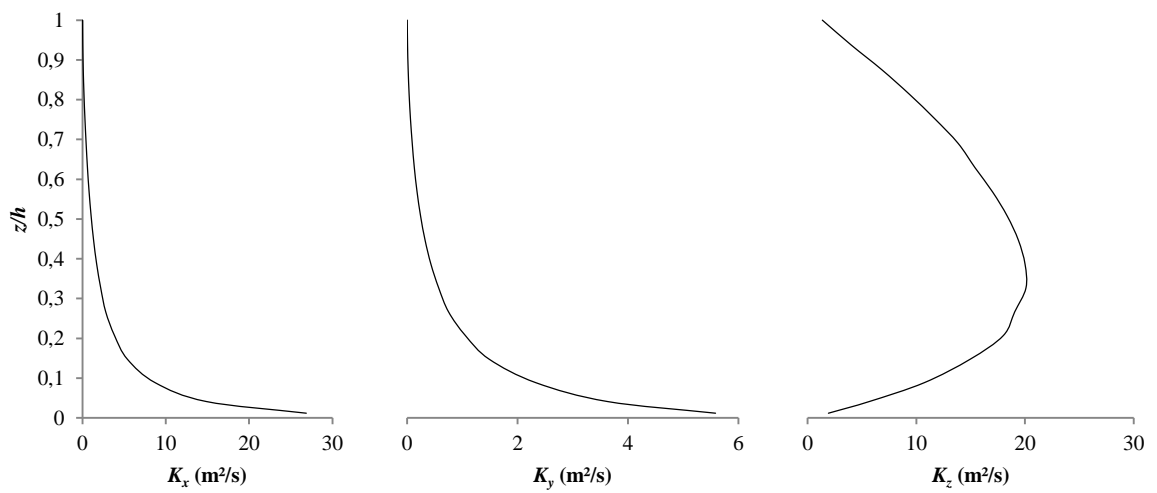


Figura 29: Perfil vertical dos coeficientes de turbulência K_x , K_y e K_z para atmosfera neutra.

Pode-se verificar que, para a atmosfera instável, os coeficientes de turbulência longitudinal (K_x) e lateral (K_y) variam pouco, com pequenas flutuações, na medida em que a altura aumenta, enquanto que o coeficiente de turbulência vertical K_z começa com um valor baixo quando próximo à superfície, aumentando consideravelmente até alcançar a altura de cerca de dois terços da camada limite atmosférica, passando a partir daí a decrescer até alcançar um valor em torno de zero próximo à camada limite. Isso se deve ao fato de que, próximo às fronteiras do eixo vertical, ou seja, próximo à superfície terrestre e à camada limite, há maior tensão entre o ar e as fronteiras, o que leva a uma diminuição da turbulência, enquanto que nas regiões onde não há tal tensão, a turbulência se torna maior. Assim, observa-se que esse comportamento e a grandeza dos valores de K_x , K_y e K_z descrevem a grande turbulência inerente à atmosfera instável.

No caso de atmosfera estável, a turbulência atmosférica descrita pelos perfis verticais de K_x , K_y e K_z apresenta um comportamento bem diferente se comparado com o cenário de atmosfera instável: K_x e K_y começam com valores maiores próximos à superfície, e rapidamente decrescem a valores próximos de zero na medida em que a altura aumenta, enquanto que K_z apresenta a mesma tendência com o aumento da altura, porém com um decréscimo menos abrupto. E uma vez que há menor turbulência atmosférica, os perfis verticais dos coeficientes K_x , K_y e K_z apresentam valores numa ordem de grandeza bem inferior do que os apresentados para atmosfera instável, verificando-se também, neste caso, que este comportamento é condizente com a condição estável da atmosfera.

Por último, os gráficos referentes ao perfil dos coeficientes K_x , K_y e K_z para atmosfera neutra mostram um comportamento híbrido: para K_x e K_y , os gráficos se assemelham ao comportamento apresentado no caso de atmosfera estável, enquanto que para K_z o gráfico tem um comportamento semelhante ao apresentado no caso instável, porém com valores consideravelmente menores em ordem de grandeza. Isso pode ser explicado pelo fato de que a atmosfera neutra ocorre, em geral, na transição entre as condições instável e estável, quando o gradiente de temperatura potencial é nulo e não há inibição nem aumento da turbulência atmosférica.

Constata-se, assim, que a incorporação da parametrização da turbulência atmosférica proposta neste trabalho para a determinação dos coeficientes K_x , K_y e K_z apresentou resultados bem satisfatórios, condizentes com o esperado para cada condição de estabilidade atmosférica.

5.3.3 Análise dos Resultados da Modelagem

Na Tabela 12 são apresentadas as características de cada camada vertical utilizada na modelagem com o MSRED e CMAQ, conforme foram configuradas e modeladas pelo WRF-LES, até a altura de 3.000 m. As informações desta tabela foram retiradas diretamente do relatório de execução do MSRED, onde z_{ce} é a altura do centro da camada (m), z_{ct} é a altura do topo da camada (m), e Δz é o tamanho da camada (m).

Tabela 12: Relação das camadas verticais e suas características, derivadas da simulação com WRF-LES e utilizadas na modelagem com o MSRED e o CMAQ.

Camada	z_{ce} (m)	z_{ct} (m)	Δz (m)
1	8,5	17,1	17,1
2	29,9	42,8	25,7
3	64,2	85,8	43,1
4	107,3	128,9	43,2
5	150,5	172,2	43,4
6	193,9	215,7	43,5
7	237,5	259,3	43,7
8	281,2	303,1	43,8
9	325,1	347	43,9
10	369,1	391,1	44,1
11	413,3	435,4	44,2
12	457,7	479,8	44,3
13	502,2	524,4	44,4
14	546,9	569,2	44,5
15	591,8	614,1	44,7
16	636,9	659,3	44,8
17	682,1	704,5	44,9
18	727,5	750	45,0
19	773,1	795,7	45,1
20	818,9	841,5	45,2
21	864,9	887,5	45,3
22	911,1	933,8	45,4
23	957,4	980,2	45,5
24	1004	1026,8	45,6
25	1050,8	1073,6	45,7
26	1097,7	1120,6	45,8
27	1144,9	1167,9	45,9
28	1192,3	1215,3	46,0
29	1239,9	1263	46,1
30	1287,7	1310,8	46,1
31	1335,8	1358,9	46,2
32	1384	1407,2	46,3
33	1432,5	1455,7	46,4
34	1481,2	1504,4	46,5

35	1530,1	1553,4	46,5
36	1579,3	1602,6	46,6
37	1628,6	1652	46,6
38	1678,2	1701,6	46,7
39	1728,1	1751,5	46,8
40	1778,1	1801,6	46,8
41	1828,4	1851,9	46,9
42	1879	1902,5	46,9
43	1929,8	1953,3	47,0
44	1980,8	2004,3	47,0
45	2032,1	2055,6	47,1
46	2083,6	2107,2	47,1
47	2135,4	2159	47,1
48	2187,4	2211	47,2
49	2239,7	2263,3	47,2
50	2292,3	2315,9	47,2
51	2345,1	2368,8	47,3
52	2398,2	2421,9	47,3
53	2451,6	2475,3	47,3
54	2505,3	2528,9	47,4
55	2559,2	2582,9	47,4
56	2613,4	2637,1	47,4
57	2667,9	2691,6	47,4
58	2722,7	2746,4	47,5
59	2777,8	2801,5	47,5
60	2833,2	2856,9	47,5
61	2888,9	2912,6	47,5
62	2944,9	2968,6	47,5
63	3001,2	3024,9	47,6

A Tabela 13 apresenta as informações referentes à altura de estabilização (z_i), raio de estabilização (r_n), tempo de estabilização (t^*), e distância percorrida até a estabilização da nuvem de exaustão de poluentes (x_k), para cada condição atmosférica e tipo de lançamento. É possível notar, para o caso de lançamento normal, a diferença que há na altura de estabilização da nuvem de exaustão entre as condições estável e neutra/instável. Esta diferença se deve à melhoria feita na modelagem matemática da formação da nuvem de exaustão proposta neste trabalho, evidenciando a importância de se utilizar uma formulação que considere as diferentes condições de estabilidade atmosférica, uma vez que em condições estáveis, a ascensão da nuvem tende a ser notoriamente reduzida, levando a alturas menores do que em casos convectivos ou neutros (Seinfeld e Pandis, 2006).

Tabela 13: Relação das informações referentes à formação da nuvem de exaustão de poluentes, para cada condição atmosférica e tipo de lançamento.

Condição Atmosférica	Tipo de Lançamento	z_i (m)	r_n (m)	t^* (s)	x_k (m)
Estável	Normal	349,4	223,1	168,7	583,0
Estável	Abortado	909,3	417,7	180,6	624,1
Instável	Normal	867,8	552,8	146,1	430,5
Instável	Abortado	695,0	311,1	111,5	328,7
Neutro	Normal	811,5	517,0	167,2	663,1
Neutro	Abortado	858,5	392,6	177,5	704,1

As Tabelas 14 e 15 apresentam, para cada tipo de lançamento e condição de estabilidade atmosférica, a altura de cada partição da nuvem de exaustão e o percentual do volume de cada partição em relação ao volume total da nuvem, conforme apresentado no relatório de execução do MSRED, onde h_{nEN} , h_{nEA} , h_{nIN} , h_{nIA} , h_{nNN} e h_{nNA} são, respectivamente, a altura (m) de cada partição da nuvem em condição atmosférica estável para lançamento normal e abortado, em condição instável para lançamento normal e abortado, e em condição neutra para lançamento normal e abortado, V_{nEN} , V_{nEA} , V_{nIN} , V_{nIA} , V_{nNN} e V_{nNA} o percentual do volume de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão em condição instável para lançamento normal e abortado, em condição instável para lançamento normal e abortado, e em condição neutra para lançamento normal e abortado.

Tabela 14: Informações sobre a altura(m) de cada partição e o volume percentual de cada uma em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para o caso de lançamento normal e para cada condição de estabilidade atmosférica, para todas as camadas que a nuvem intercepta.

Camada	h_{nEN} (m)	V_{nEN} (%)	h_{nIN} (m)	V_{nIN} (%)	h_{nNN} (m)	V_{nNN} (%)
1	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0
4	127,6	0,010	0	0	0	0
5	170,8	5,238	0	0	0	0
6	214,2	9,259	0	0	0	0
7	257,7	12,203	0	0	0	0
8	301,4	14,044	0	0	298,8	0,021
9	345,2	14,765	331,0	0,248	342,6	1,132
10	349,4	14,812	375,0	1,226	386,5	2,074
11	393,5	14,275	419,0	2,044	430,6	2,931
12	437,7	12,564	463,2	2,791	474,8	3,702
13	482,0	9,662	507,5	3,467	519,1	4,383
14	526,4	5,551	551,9	4,070	563,5	4,975
15	570,9	0,017	596,5	4,599	608,0	5,475
16	0	0	641,1	5,053	652,7	5,882
17	0	0	685,9	5,430	697,5	6,194
18	0	0	730,8	5,728	742,3	6,409
19	0	0	775,8	5,948	787,3	6,527

20	0	0	820,9	6,088	811,5	6,556
21	0	0	867,8	6,145	856,7	6,520
22	0	0	913,1	6,118	902,0	6,384
23	0	0	958,5	6,006	947,4	6,144
24	0	0	1004,0	5,811	992,9	5,800
25	0	0	1049,6	5,529	1038,5	5,351
26	0	0	1095,3	5,160	1084,1	4,794
27	0	0	1141,1	4,704	1129,9	4,130
28	0	0	1187,0	4,158	1175,8	3,357
29	0	0	1232,9	3,523	1221,8	2,474
30	0	0	1279,0	2,797	1267,8	1,479
31	0	0	1325,1	1,979	1319,7	0,087
32	0	0	1371,4	1,070	0	0
33	0	0	1413,9	0,044	0	0

Tabela 15: Informações sobre a altura (m) de cada partição e o volume percentual de cada uma em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para o caso de lançamento abortado e para cada condição de estabilidade atmosférica, para todas as camadas que a nuvem intercepta.

Camada	h_{nEA} (m)	V_{nEA} (%)	h_{nIA} (m)	V_{nIA} (%)	h_{nNA} (m)	V_{nNA} (%)
1	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0
7	0	0	240,5	5,248	0	0
8	293,4	2,008	284,1	12,198	286,0	3,768
9	337,2	9,112	327,9	12,235	329,8	9,696
10	381,2	9,138	371,9	12,270	373,8	9,723
11	425,2	9,164	401,2	12,305	417,8	9,751
12	469,4	9,189	445,4	12,338	462,0	9,778
13	513,7	9,213	489,7	12,371	495,5	9,803
14	524,8	9,237	534,1	12,403	540,0	9,829
15	569,4	9,261	575,0	1,606	584,5	9,854
16	614,0	9,284	0	0	629,2	9,879
17	658,8	9,307	0	0	673,9	9,904
18	703,7	9,330	0	0	713,3	1,939
19	758	1,65	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0
21	0	0	0	0	0	0
22	0	0	0	0	0	0
23	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0
25	0	0	0	0	0	0
26	0	0	0	0	0	0

27	0	0	0	0	0	0
28	0	0	0	0	0	0
29	0	0	0	0	0	0
30	0	0	0	0	0	0
31	0	0	0	0	0	0

A Figura 30 apresenta uma análise gráfica da distribuição vertical do volume percentual de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para cada condição atmosférica e para o caso de lançamento normal. Analisando a Tabela 14 em conjunto com a Figura 30, é possível notar que a nuvem possui formato esférico, sendo de menor tamanho no caso estável do que nos casos instável e neutro. Cada cenário possui a mesma quantidade de massa liberada pelo foguete, porém a nuvem formada possui um maior ou menor volume de acordo com a condição de estabilidade atmosférica.

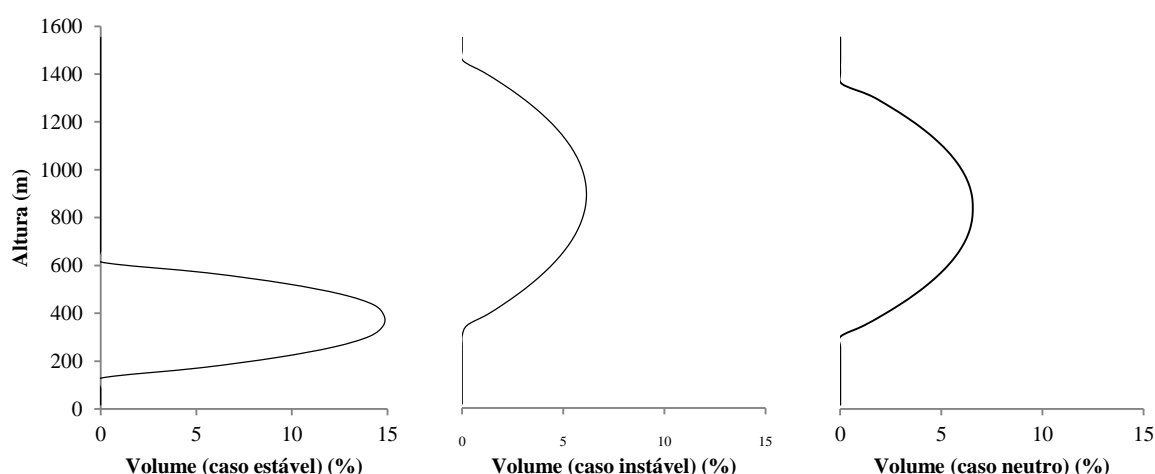


Figura 30: Volume percentual de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para o caso de lançamento normal, e para as condições atmosféricas estável, instável e neutra, respectivamente.

A Figura 31, por sua vez, apresenta a mesma análise gráfica da distribuição vertical do volume percentual de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para cada condição atmosférica e para o caso de lançamento abortado. Neste caso a nuvem tem um formato cilíndrico, o que pode ser constatado pela análise dos gráficos. Em ambas as análises gráficas dos casos apresentados (lançamento normal e abortado), verifica-se que o comportamento da distribuição vertical das partições é consistente com a modelagem matemática da formação da nuvem de exaustão apresentada neste trabalho.

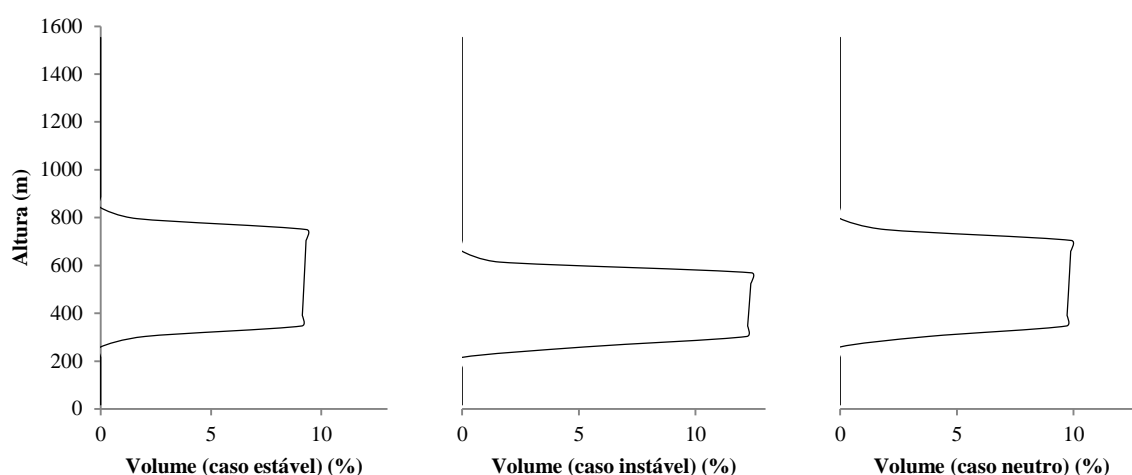


Figura 31: Volume percentual de cada partição em relação ao volume total da nuvem de exaustão, para o caso de lançamento abortado, e para as condições atmosféricas estável, instável e neutra, respectivamente

É importante ressaltar que o somatório do volume percentual das partições não será exatamente igual a 100% devido ao processo de discretização da nuvem de exaustão, em que cada partição da nuvem é transformada em um disco cilíndrico (ver Seção 4.3). Para ilustrar isso, a Figura 32 apresenta as porções das partições da nuvem que se sobressaem ao volume da esfera devido ao processo de particionamento.

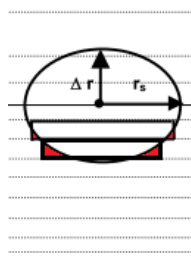


Figura 32: Ilustração do processo de discretização da nuvem de exaustão, em que cada partição é tratada como um disco cilíndrico, sinalizando a porção do volume da partição que se sobressai ao volume da porção equivalente da esfera.

As figuras a seguir mostram os cenários da modelagem com MSRED e CMAQ para o poluente HCl. Elas foram geradas automaticamente por um processo computacional que será incorporado ao *framework* a ser desenvolvido para a execução e avaliação operacional do sistema de modelagem apresentado neste trabalho. Foi escolhido analisar o impacto do poluente HCl devido ao seu alto grau de periculosidade e impacto na qualidade do ar ambiente, uma vez que o HCl é um gás incolor com um odor irritante e pungente, perceptível a partir de concentrações em torno de 0,8 ppm (Lide, 2003), sendo corrosivo aos olhos, pele e membranas mucosas. A exposição aguda em um curto intervalo de tempo pode causar tosse, rouquidão, inflamação e ulceração do trato respiratório, dor no peito, e edema pulmonar em

humanos (US EPA, 1993; 1999). A Tabela 16 (Baxter et al., 2000) apresenta os limites de exposição ao gás clorídrico (HCl), em ppm, e seu impacto sobre a saúde humana.

Tabela 16: Efeitos na saúde humana causados pela exposição ao gás HCl (Baxter et al., 2003).

Limites de Exposição (ppm)	Efeitos causados na saúde humana
5<	Tosse
35	Irritação na garganta ocorre após somente um curto espaço de tempo
35<	Dificuldade severa em respirar e queimaduras ou inflamações na pele
10-50	Nível máximo que pode ser mantido por várias horas
100<	Inchaço dos pulmões e espasmos na garganta
50-1.000	Tempo máximo de exposição: 1 hora
1.000-2.000	Muito perigoso mesmo para exposição por um curto espaço de tempo

A Figura 33 apresenta o cenário de concentração do poluente HCl a nível de superfície com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição atmosférica instável. Pode-se perceber que os níveis de concentração, mesmo próximos ao CLA, são relativamente baixos, porém podendo causar desconforto no trato respiratório e pulmonar de algum indivíduo que se exponha ao poluente. Também, as concentrações são um pouco maiores em $t = 40\text{min}$ após o lançamento, mostrando a importância de se avaliar o impacto da nuvem de exaustão de foguetes numa escala temporal de minutos.

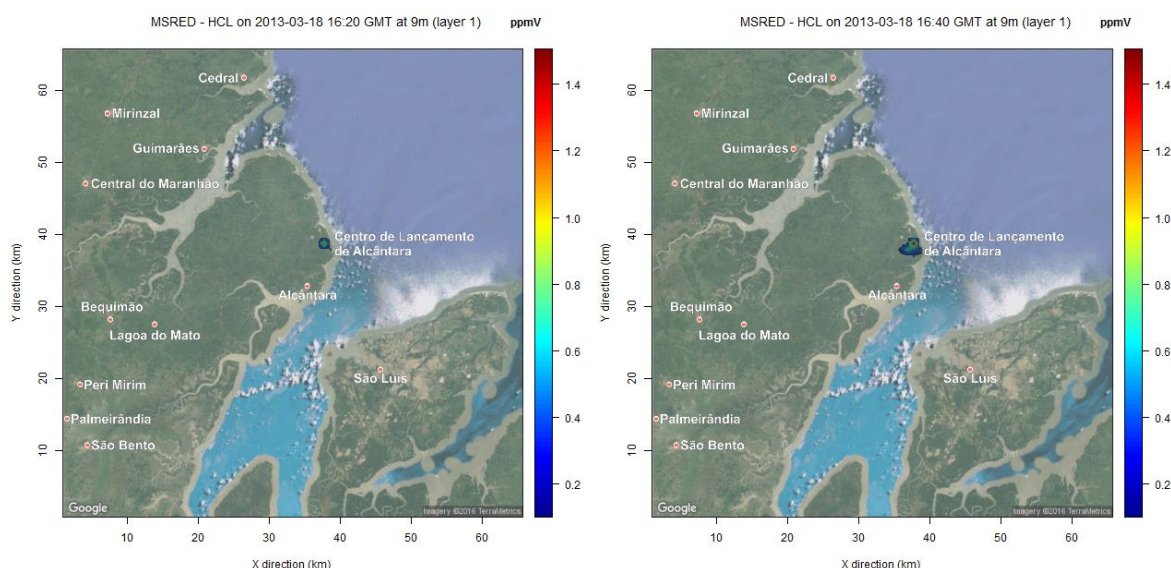


Figura 33: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição instável.

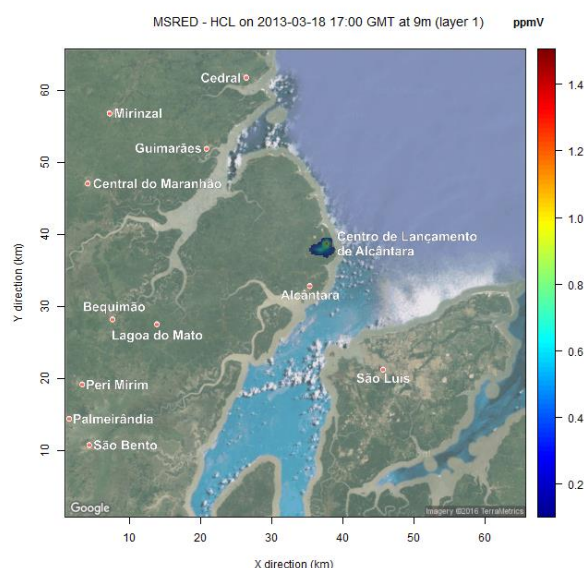


Figura 33: Continuação.

A Figura 34 apresenta, por sua vez, o cenário de concentração média de HCL da primeira hora após o lançamento, para cada nível vertical até o topo da camada limite atmosférica (que se encontra na camada 19, para este caso). Este é o cenário que corresponde ao arquivo de condições iniciais gerado pelo MSRED para entrada no modelo CMAQ. Nas primeiras camadas a concentração assume valores relativamente baixos, mas que aumentam nas camadas correspondentes às partições da nuvem de exaustão, alcançando seu valor máximo nas partições com maior volume (e consequentemente com maior emissão).

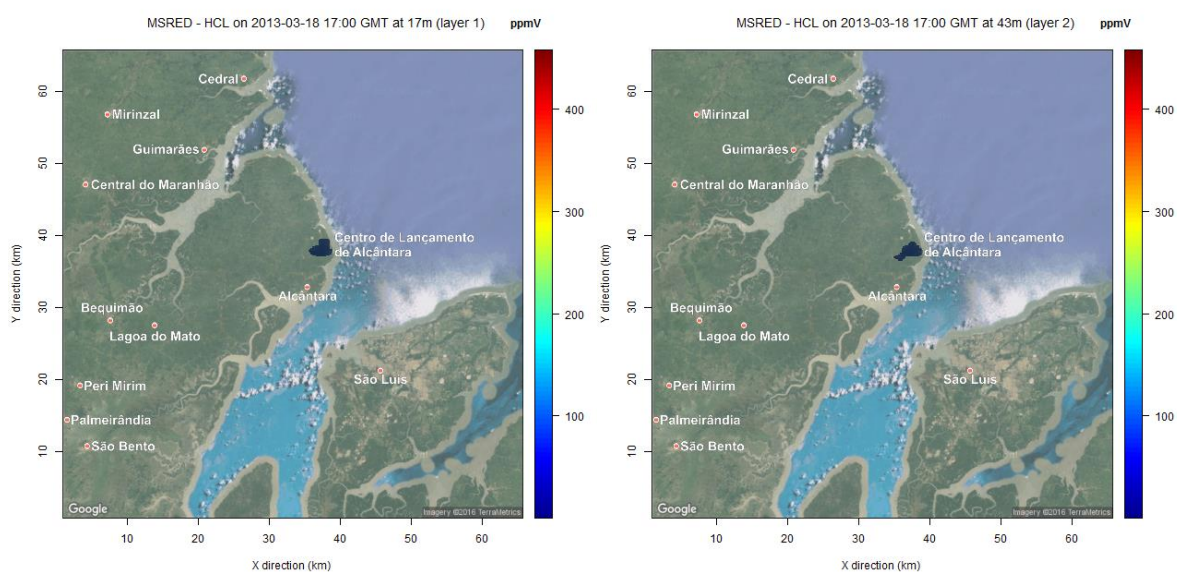


Figura 34: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCL para cada nível vertical, para o caso de lançamento normal e condição instável.

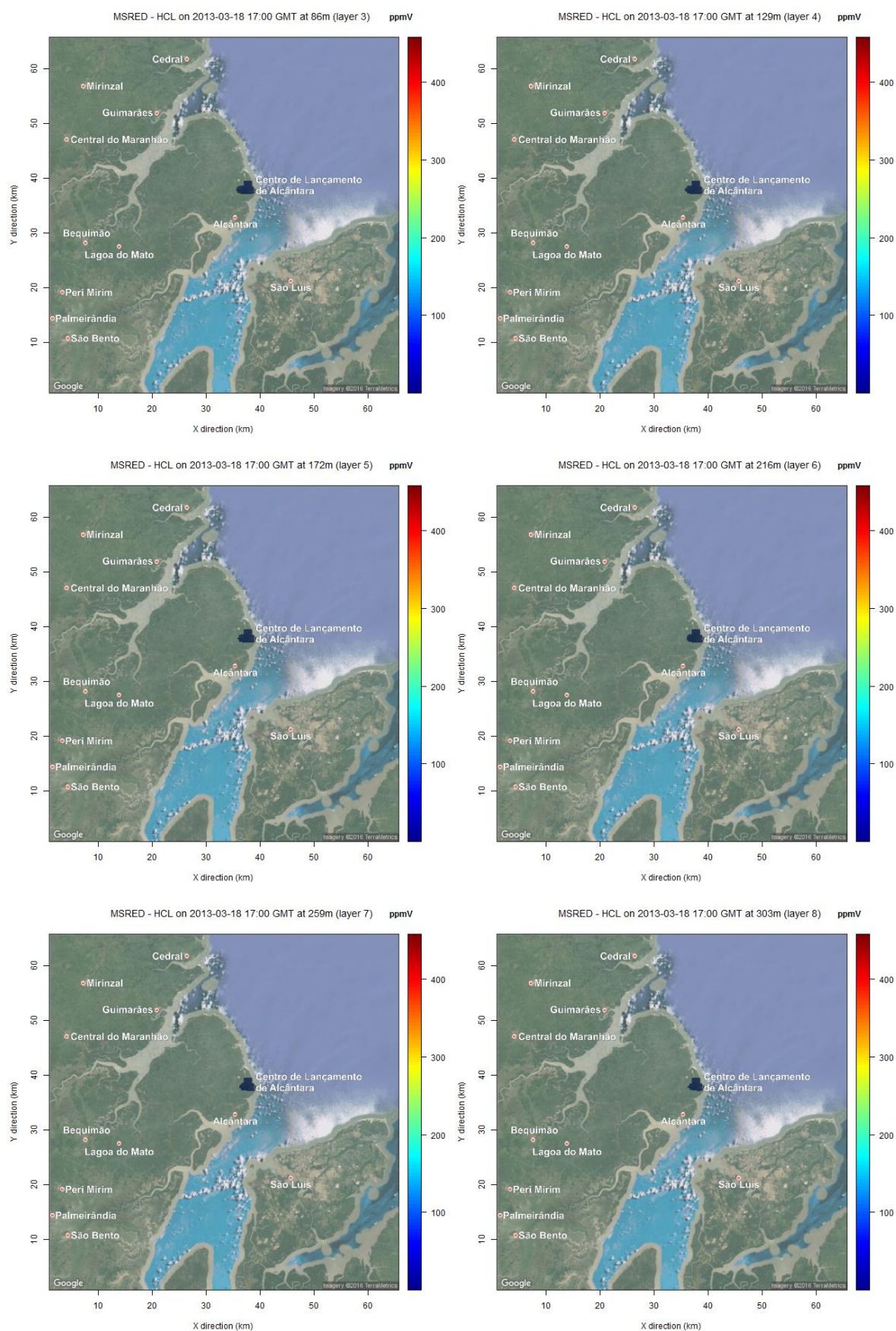


Figura 34: Continuação.

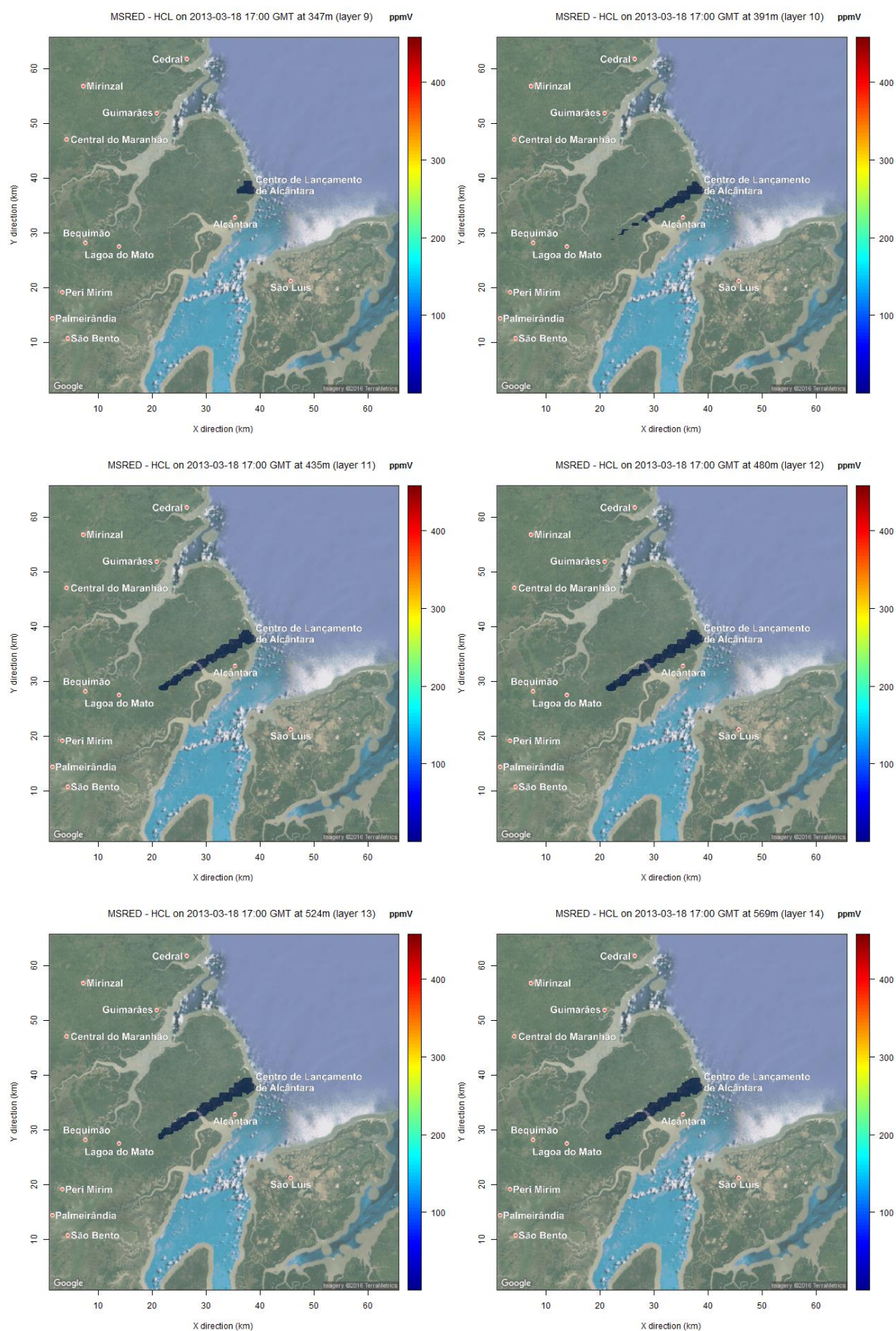


Figura 34: Continuação.

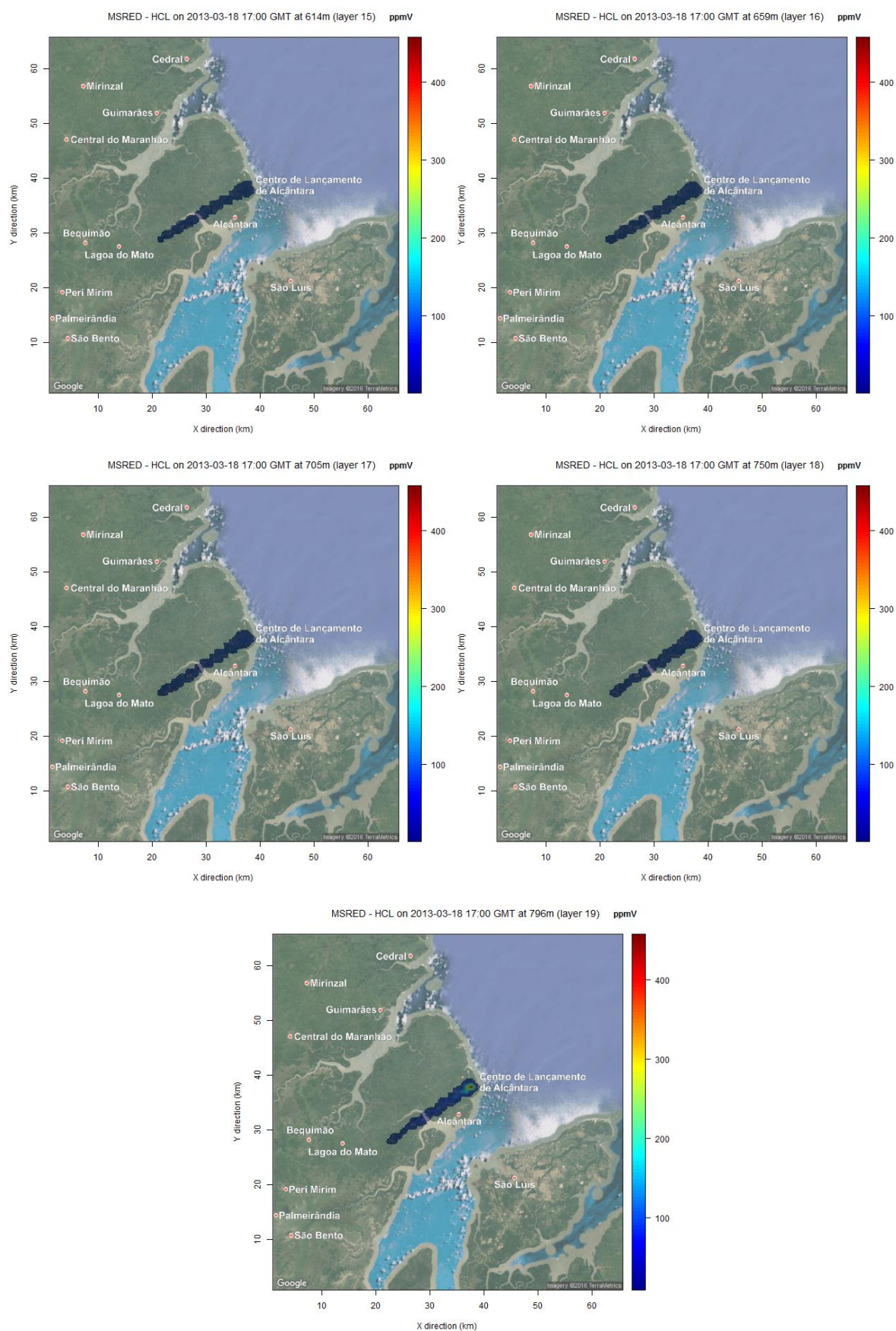


Figura 34: Continuação.

O cenário apresentado anteriormente foi utilizado como as condições iniciais de entrada no modelo CMAQ, para a modelagem de longo alcance do impacto da nuvem de exaustão. Assim, após a execução do MSRED, o modelo CMAQ foi executado, gerando um cenário de concentração média de HCl ao nível da superfície com intervalo de 20 minutos que é apresentado a seguir na Figura 35.

É possível notar que a nuvem de exaustão, após 1 hora e 20 minutos (às 17:20h GMT), terá viajado cerca de 15 km do centro de lançamento, o que é condizente com a velocidade do vento à superfície na hora do lançamento, que de acordo com a Tabela 10 é de 2,9 m/s para este caso. Neste momento, as concentrações de HCl são menores do que no início da segunda hora, o que é esperado, pois com o passar do tempo o poluente sofre processos físicos e químicos que tendem a diminuir a concentração. Porém, elas começam a aumentar a partir do cenário de 17:40h GMT e permanecem mais elevadas até o penúltimo quadro, duas horas depois. Isso se deve ao caráter tridimensional da solução implementada no MSRED e de seu acoplamento com o CMAQ, pois o MSRED calcula o campo de concentração tridimensional para entrada no modelo fotoquímico baseado nas emissões das partições da nuvem distribuídas nas diversas camadas verticais, que por sua vez são também modeladas tridimensionalmente pelo modelo CMAQ. Então, devido à turbulência atmosférica e aos processos de deposição, difusão e advecção, a massa do poluente presente nas camadas superiores irá, eventualmente, ser transportada à camada de superfície, aumentando os valores de concentração do poluente nesta camada.

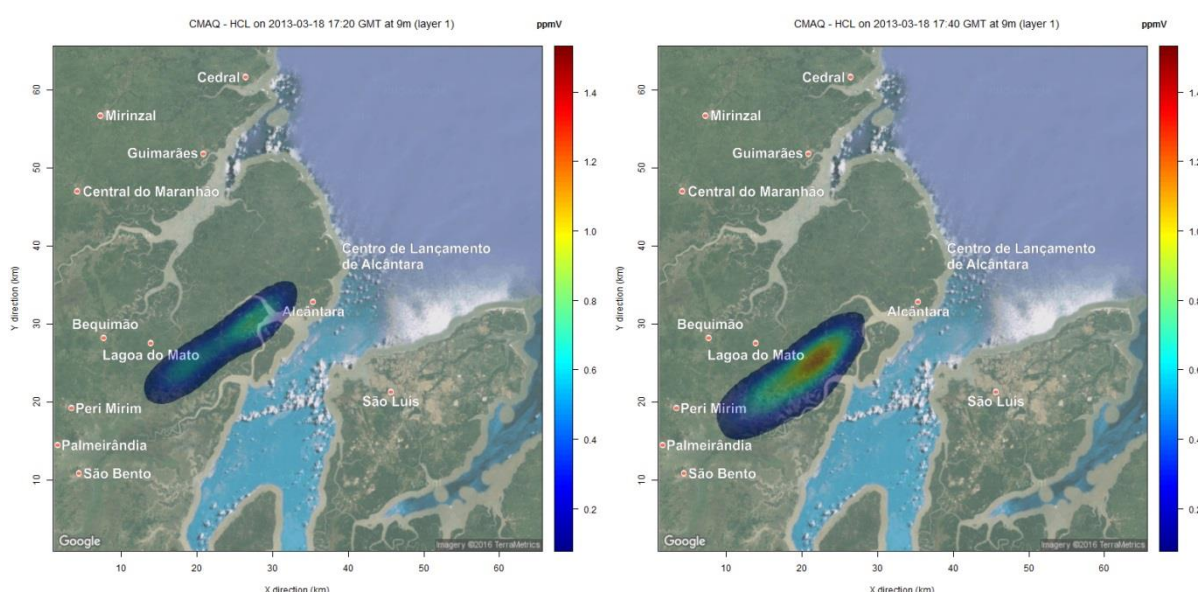


Figura 35: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição instável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.

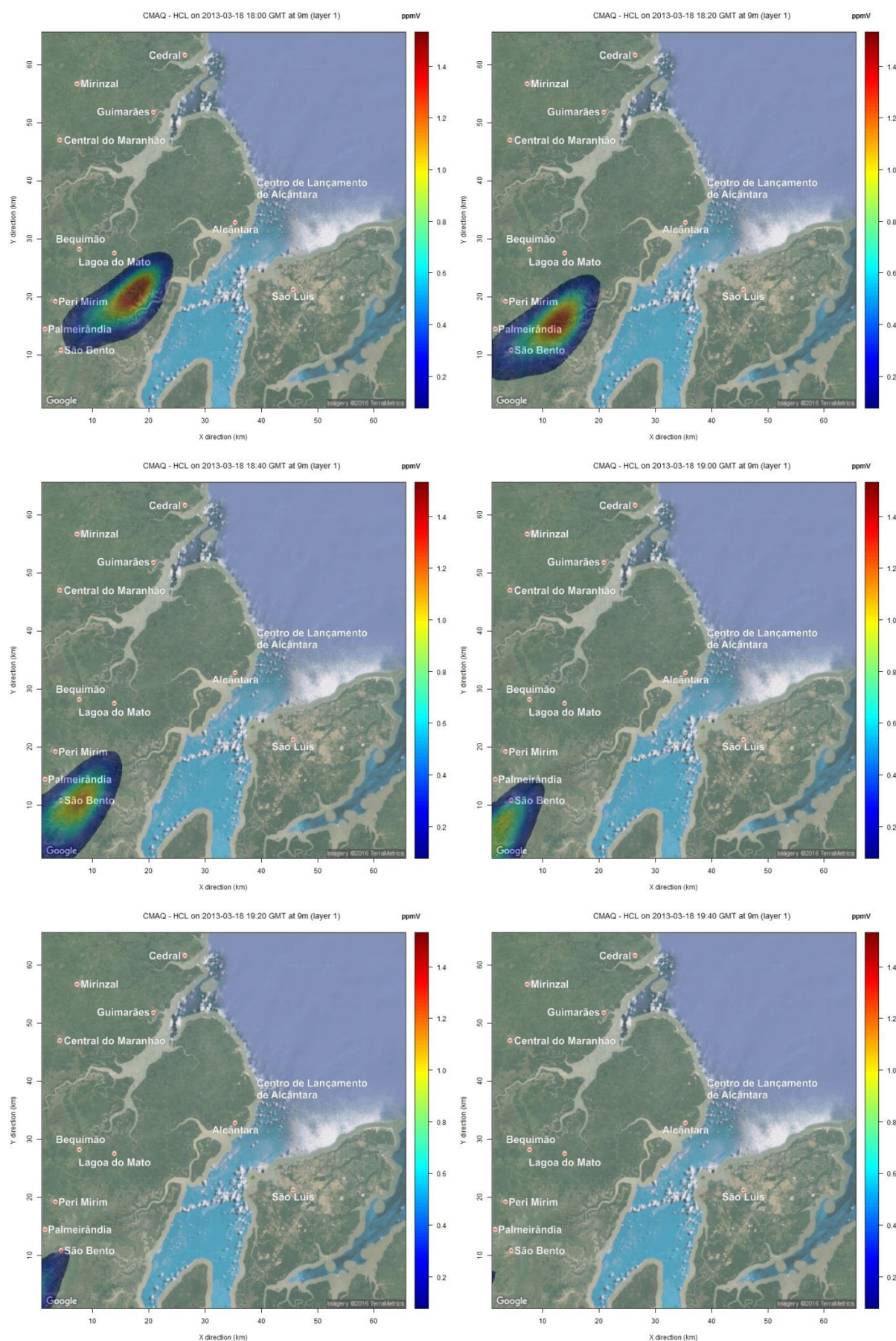


Figura 35: Continuação.

A análise deste cenário mostra, também, a importância da utilização da abordagem híbrida para avaliação integrada do impacto no ar ambiente da grande nuvem de exaustão de poluentes devido ao lançamento de foguetes, tanto para a devida modelagem da formação da nuvem e da curta escala de tempo e espaço em que o fenômeno ocorre, quanto para a modelagem do transporte químico de longo alcance a fim de avaliar o impacto em receptores localizados a distâncias maiores.

Foram avaliados também mais dois cenários alternativos de modelagem com o MSRED e CMAQ, para este mesmo caso: um considerando como condição inicial para o CMAQ o campo de concentração instantânea gerado pelo MSRED ao final da hora, ou seja, o cenário de 60 minutos sem a média horária, e a saída do CMAQ com média de 20 minutos (Figura 36), e o outro considerando o campo de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED como condição inicial para entrada no CMAQ, e sua saída com média horária (Figura 37). Esses dois cenários mostram como o MSRED, em conjunto com o CMAQ, podem ser utilizados na avaliação do impacto de nuvens de foguetes, permitindo a utilização de diferentes configurações de cenários.

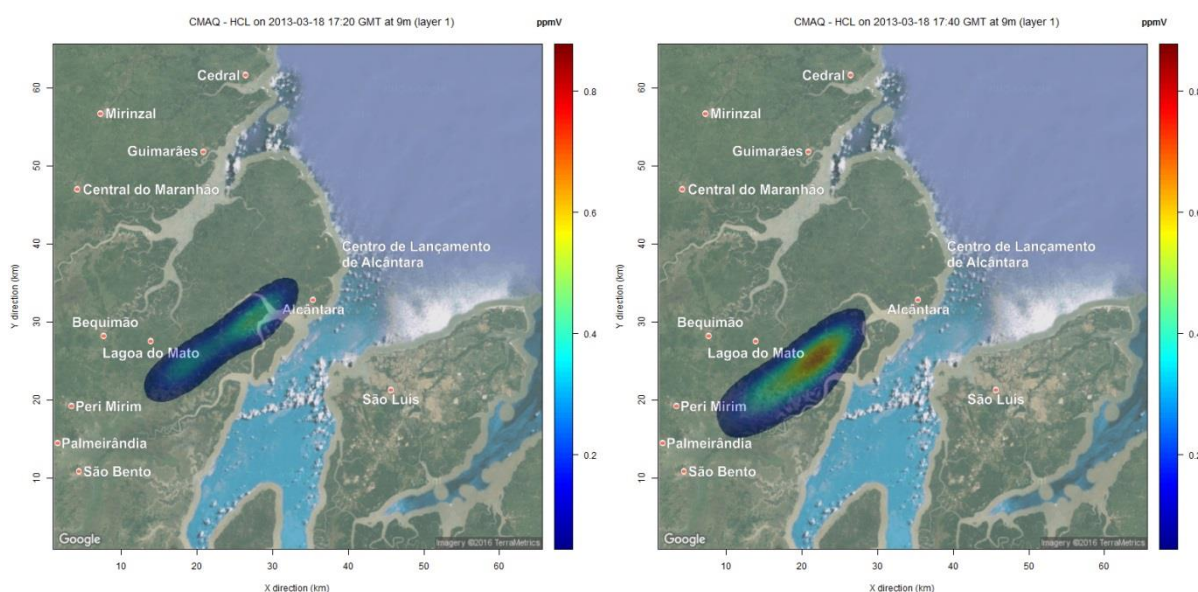


Figura 36: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição instável, usando como condição inicial o cenário de concentração do final da hora (cenário de concentração instantânea de 60min) modelado pelo MSRED.

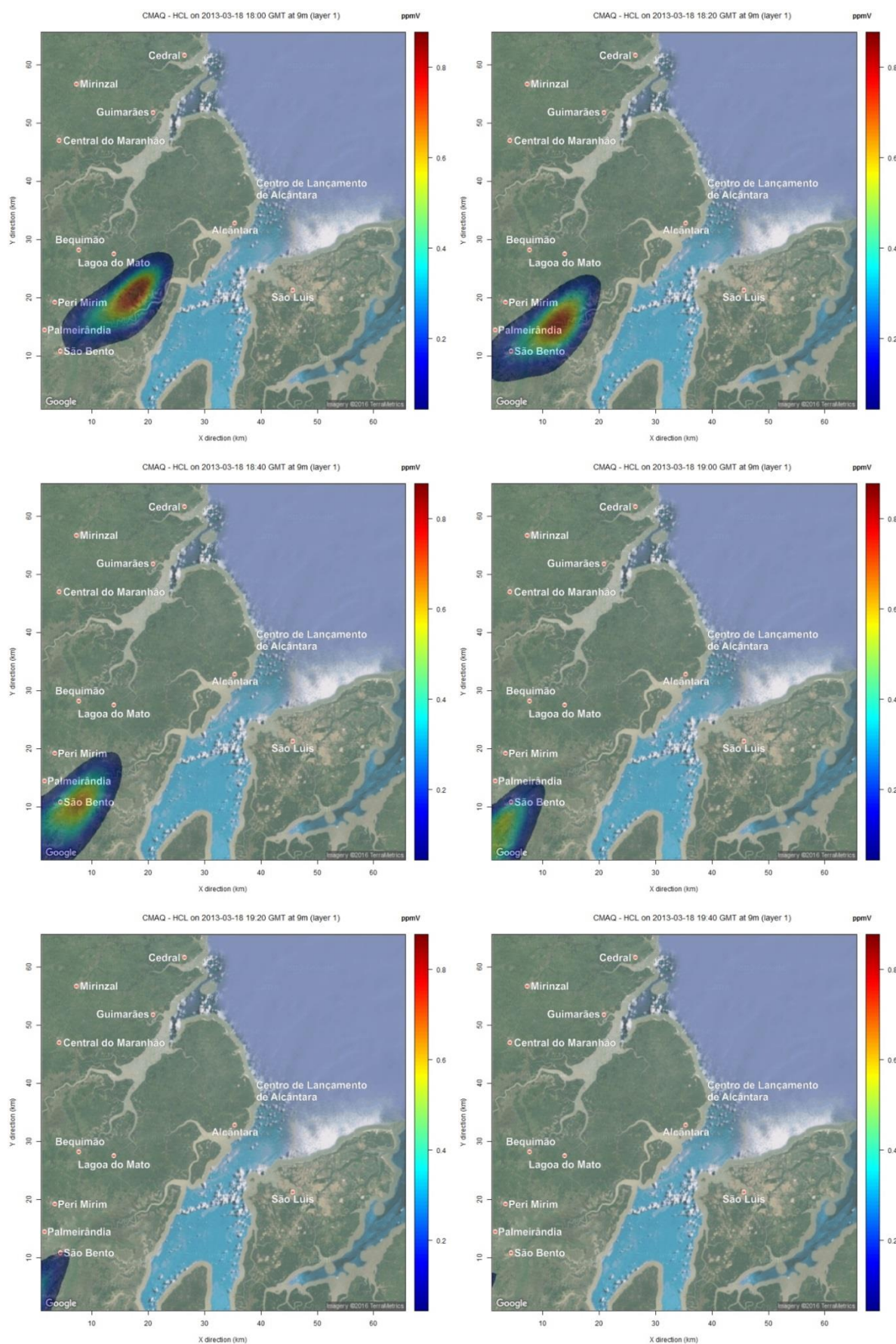


Figura 36: Continuação.

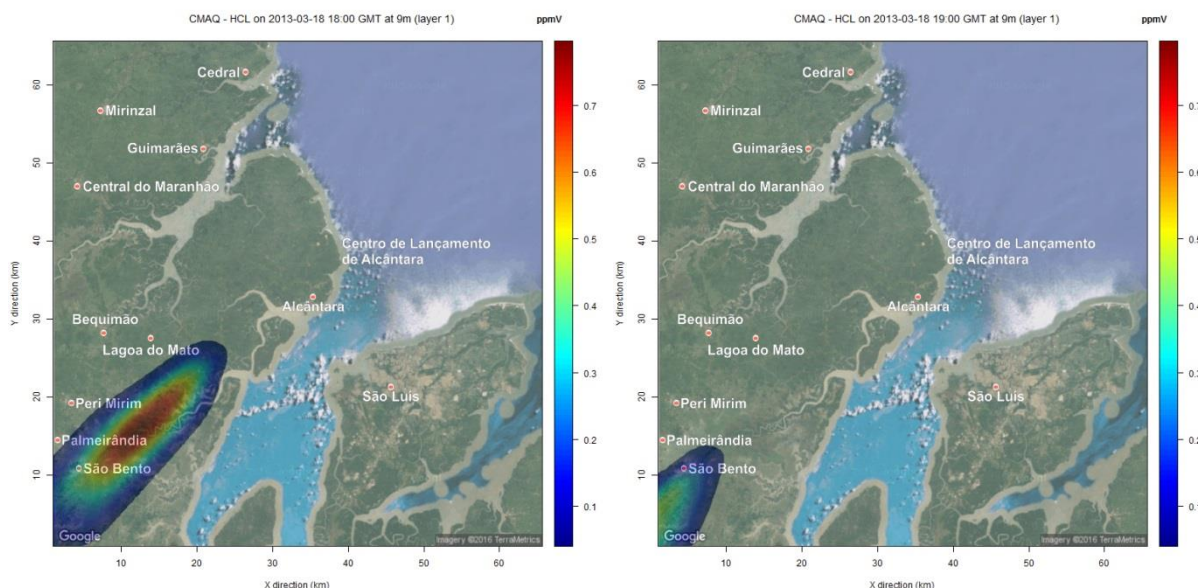


Figura 37: Cenário de concentração média de 1h do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição instável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.

A Figura 38 mostra o cenário de concentração do poluente HCl a nível de superfície com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição atmosférica estável. Ao contrário do cenário convectivo, os níveis de concentração são bem maiores neste caso, chegando a concentrações superiores a 150 ppm de HCl nos primeiros 20 minutos após o lançamento, que são valores elevados se comparados com o dano que podem causar à saúde humana, mesmo por um período curto de exposição. Exposições a níveis acima de 50 ppm de HCl são considerados perigosos a ponto de causar danos diretos à saúde ou à vida (CDC, 2014).

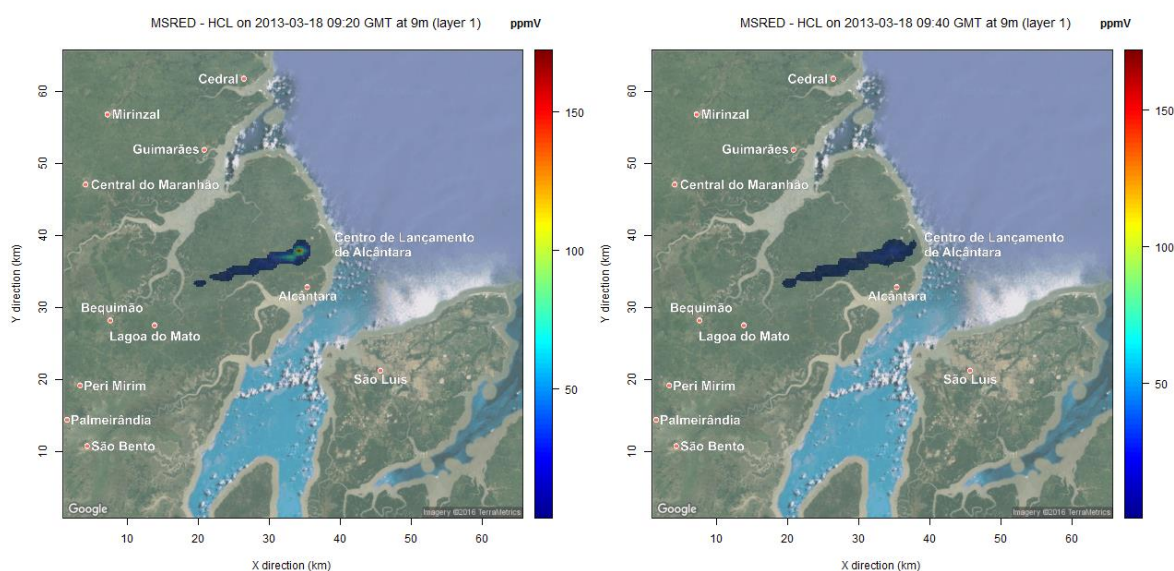


Figura 38: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição estável.

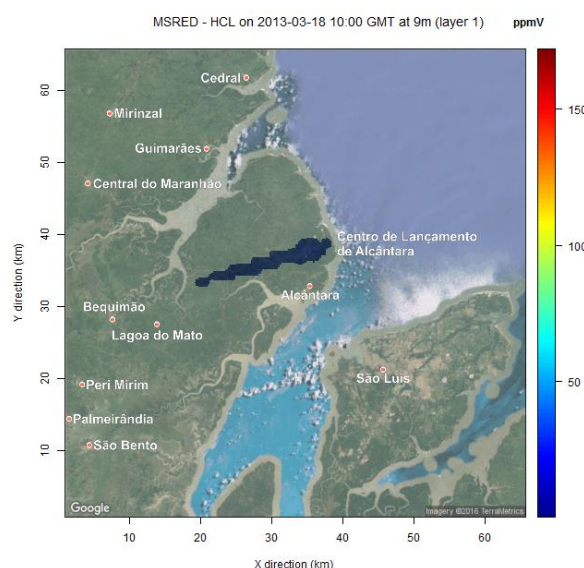


Figura 38: Continuação.

Pode-se notar que um lançamento nesta condição atmosférica poderia causar um impacto mais severo na qualidade do ar, devido aos altos índices de concentrações de HCl simulados. Embora nenhuma região com maior densidade populacional esteja sob a influência da nuvem de exaustão neste cenário de avaliação do impacto de curto alcance, fica evidente a importância de se analisar com antecedência o impacto que o lançamento de um foguete pode causar nos arredores do local de lançamento, principalmente em condições atmosféricas desfavoráveis à dispersão, como é o caso aqui simulado.

A Figura 39 mostra o cenário de concentração média de HCl da primeira hora após o lançamento, para cada nível vertical até a camada em que há concentrações simuladas, correspondendo ao cenário de condições iniciais gerado pelo MSRED para a modelagem do transporte químico com o CMAQ para este caso. Conforme fora apresentado na Tabela 14, o topo da nuvem se encontra no nível 15, estando totalmente abaixo da camada limite atmosférica, que neste caso se encontra na camada 21. Tal como no caso anterior, nas camadas mais próximas à superfície as concentrações são relativamente bem inferiores do que nas camadas onde há emissões devido às partições da nuvem; nestas camadas, as concentrações são muito maiores do que no caso convectivo, o que se deve tanto à maior concentração de massa em um menor volume, quanto à menor difusão que há devido à menor turbulência.

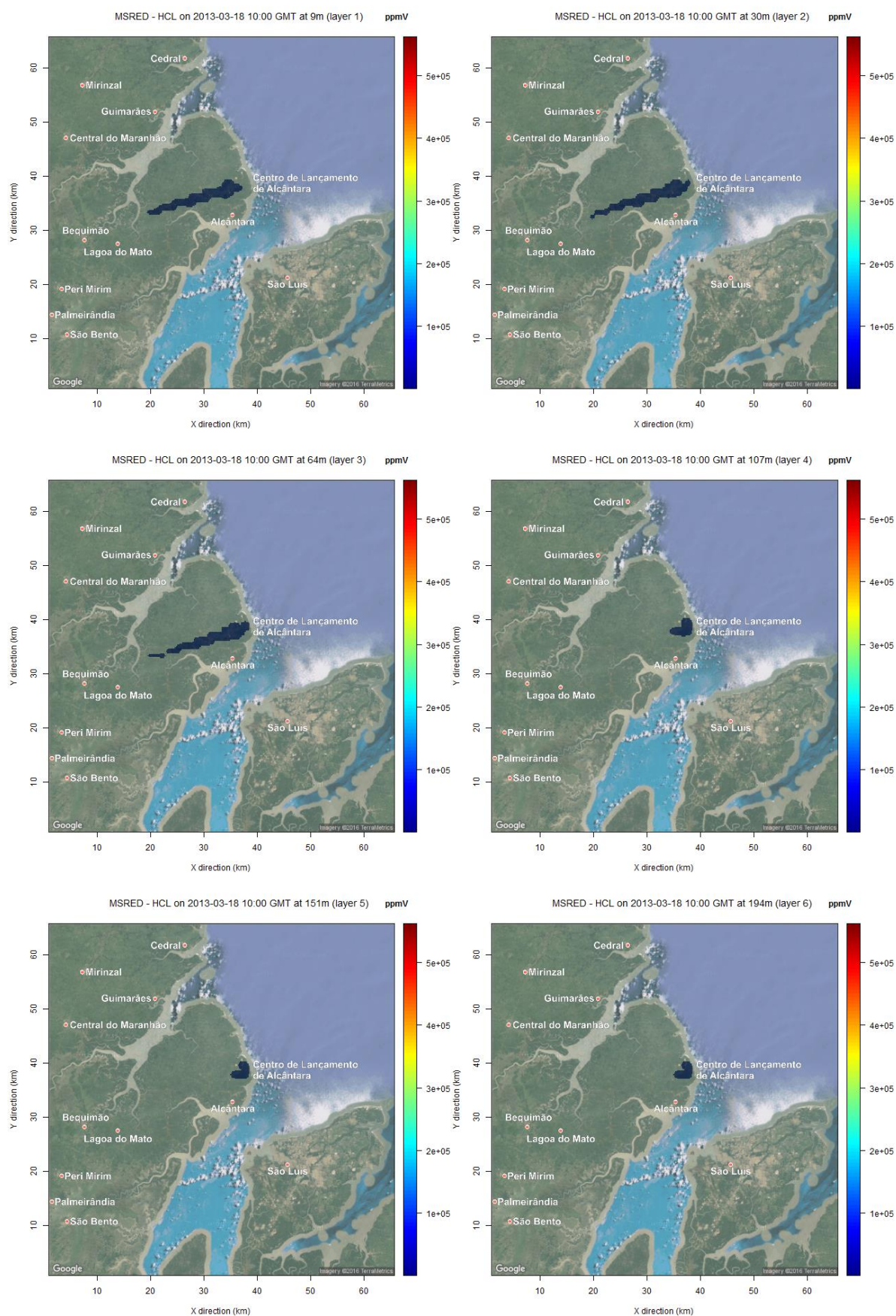


Figura 39: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCL para cada nível vertical, para o caso de lançamento normal e condição estável.

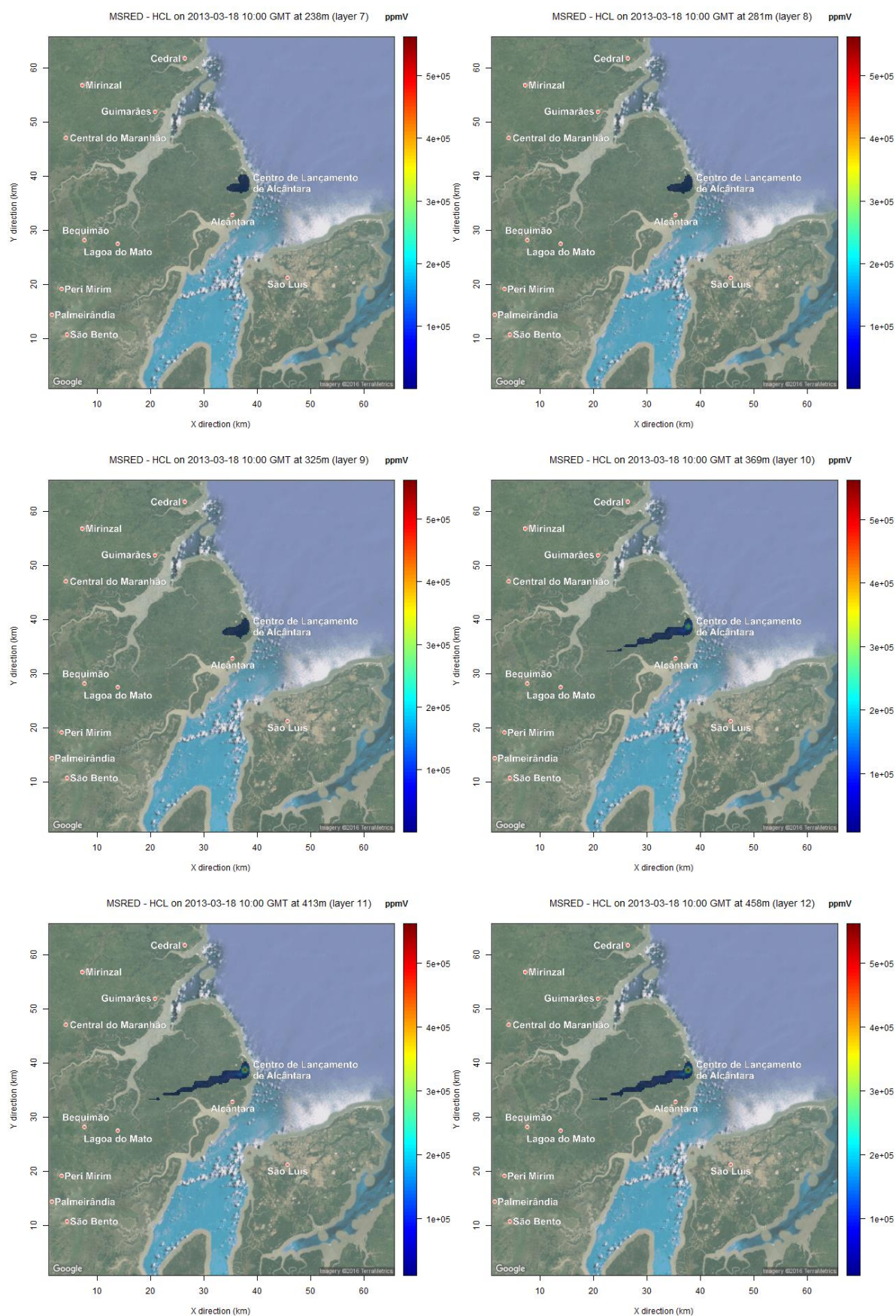


Figura 39: Continuação.

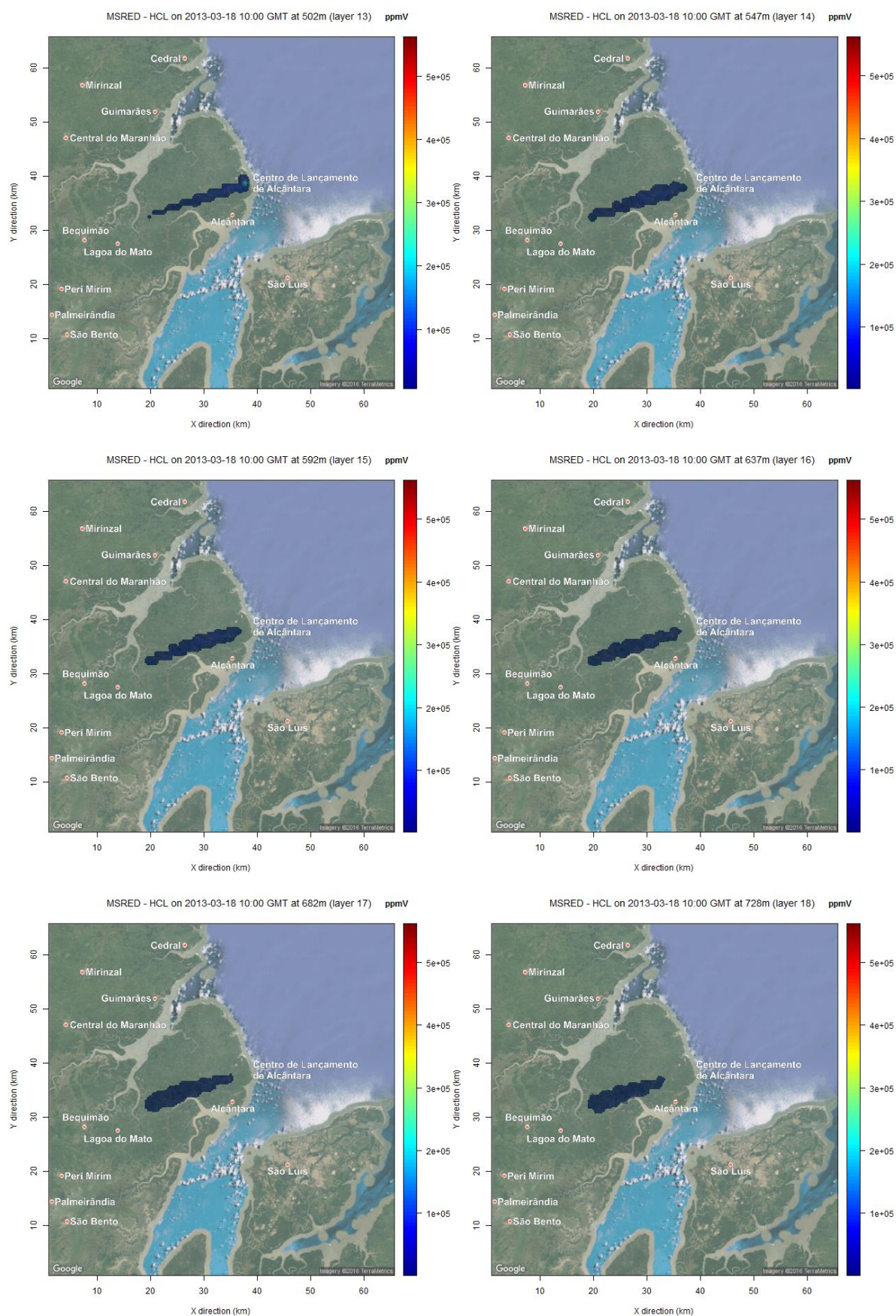


Figura 39: Continuação.

A Figura 40 a seguir apresenta o cenário de concentração média de 20 minutos de HCl modelado pelo CMAQ utilizando as condições iniciais geradas pelo MSRED que foram apresentadas anteriormente. Do mesmo modo que no caso convectivo, as concentrações aumentam com o passar do tempo, contudo as concentrações ao nível da superfície são bem maiores que no caso anterior. Isto se deve aos fatos de que a nuvem de exaustão está mais baixa, menos distribuída verticalmente que no cenário convectivo e, portanto, mais densa, e à menor turbulência inerente à atmosfera em condição estável, o que dificulta a dispersão do contaminante na atmosfera.

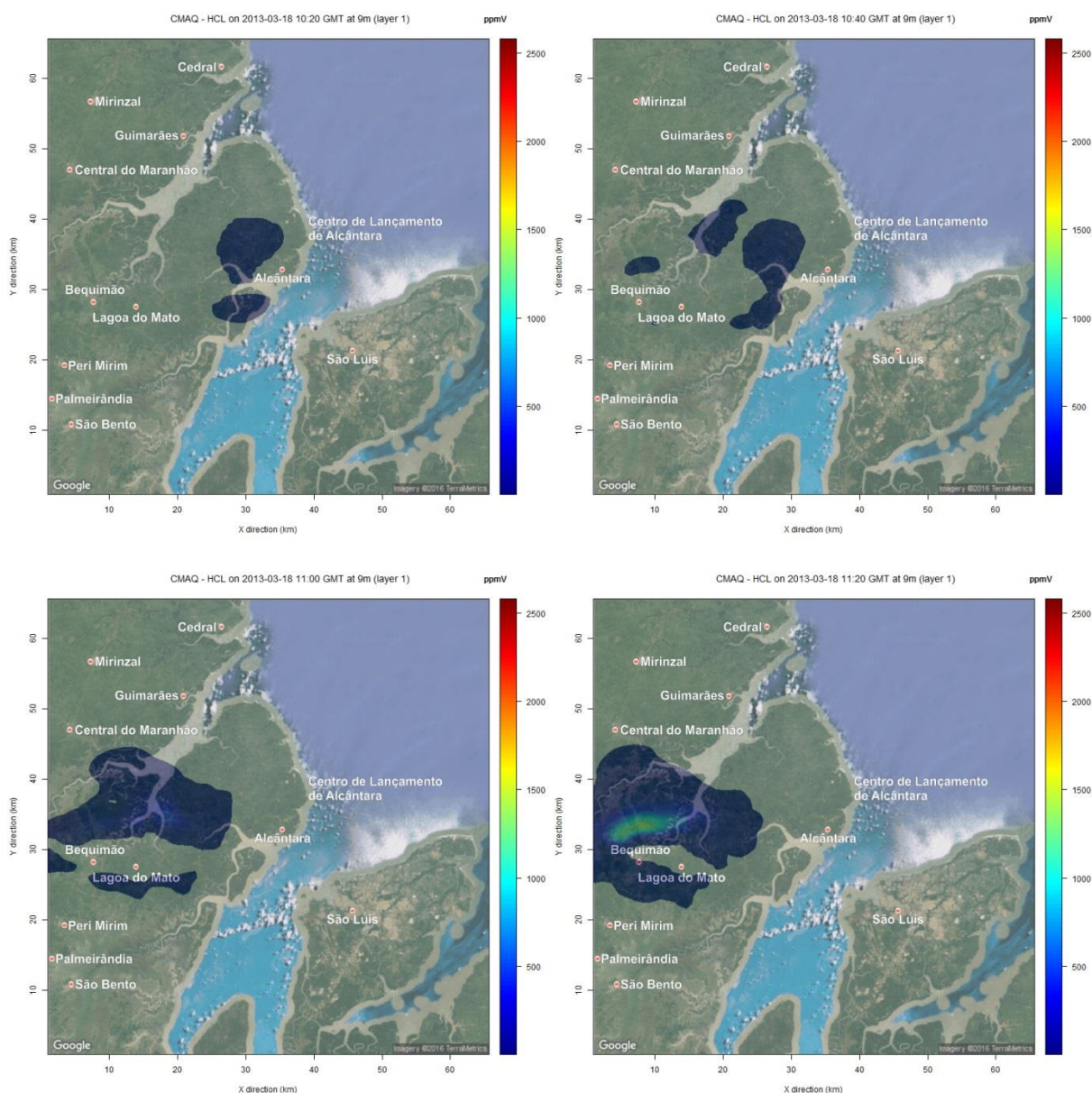


Figura 40: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição estável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.

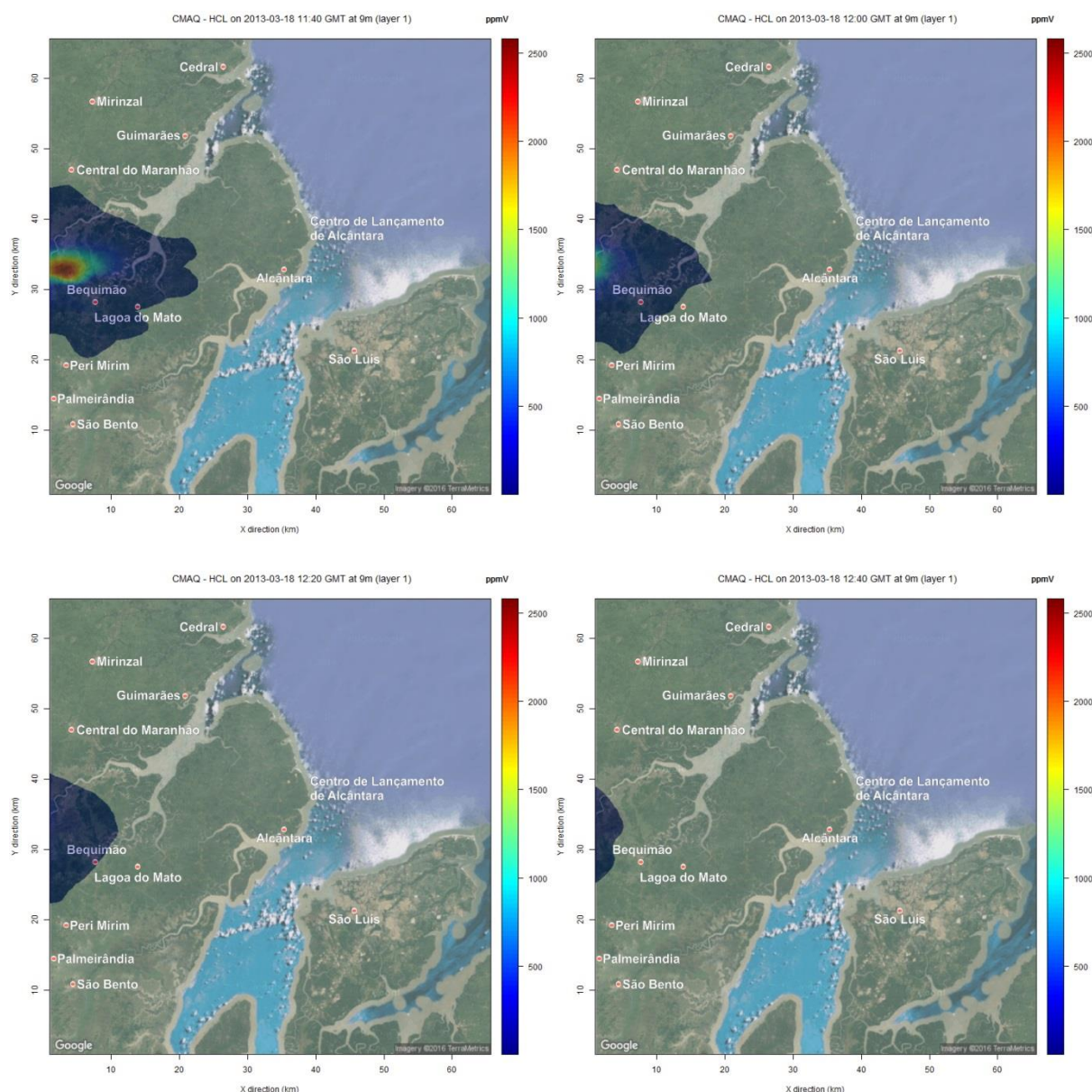


Figura 40: Continuação.

A modelagem tridimensional de longo alcance do transporte químico com o modelo CMAQ permitiu verificar que, em condições estáveis, as concentrações de HCl aumentaram consideravelmente a níveis muito perigosos para a saúde humana, com potencial muito grande de impactar as cidades localizadas a sudoeste e oeste do CLA, tais como Lagoa do Mato e Bequimão.

A Figura 41 mostra o cenário de concentração do poluente HCl a nível de superfície com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição atmosférica neutra.

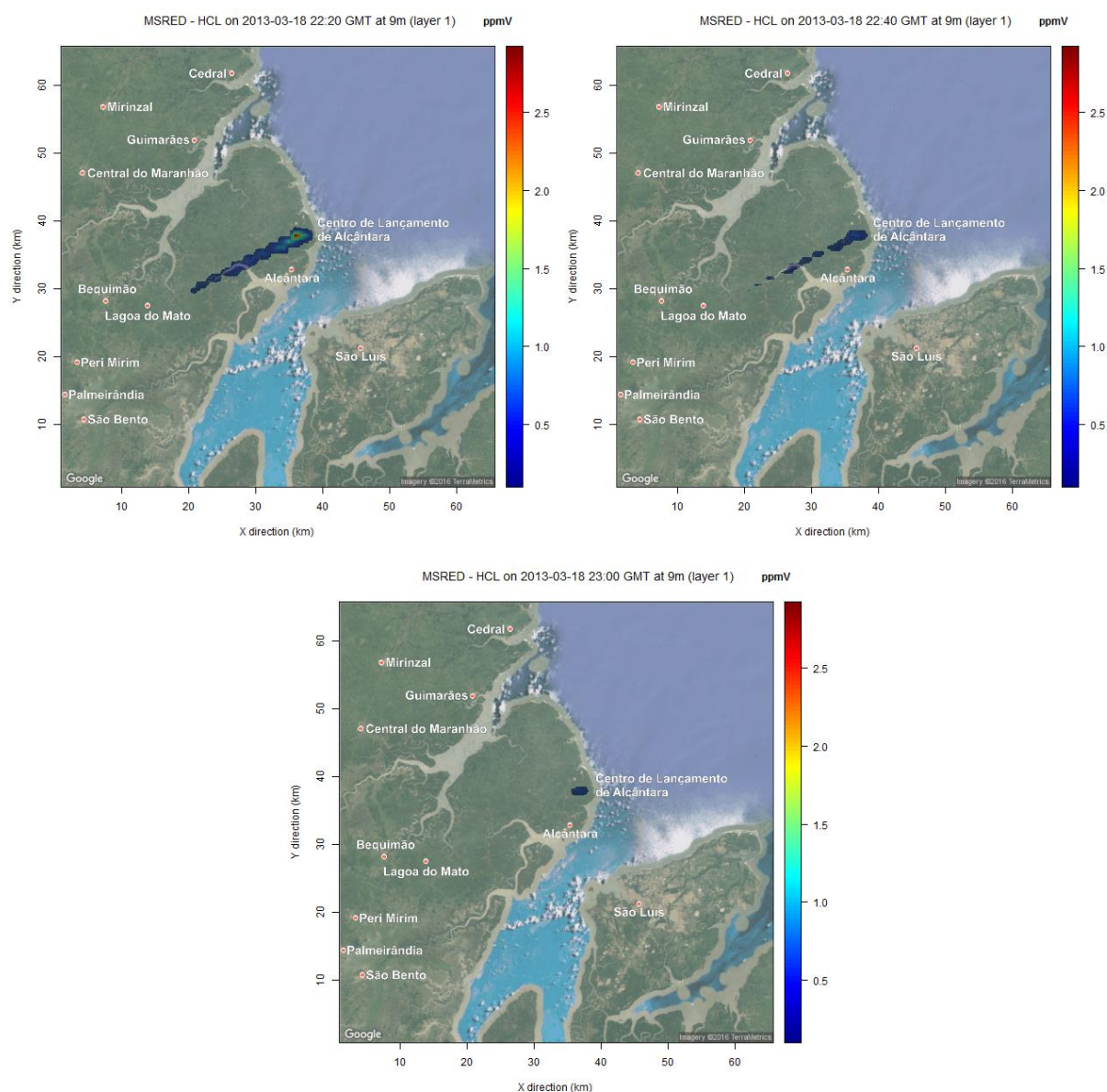


Figura 41: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento normal e condição neutra.

Já a Figura 42 mostra, para este mesmo caso, o cenário de concentração média de HCl da primeira hora após o lançamento utilizado como as condições iniciais de entrada para a modelagem com o CMAQ do transporte químico de longo alcance, para cada nível vertical até a camada em que há concentrações simuladas. Neste caso, o cenário da modelagem do transporte químico com o CMAQ não apresentou concentrações de HCl significativas a nível de superfície (ver Figura 43), sendo este, portanto, dentre os três cenários de lançamento normal apresentados, o cenário que apresentou menores valores de concentração do poluente HCl.

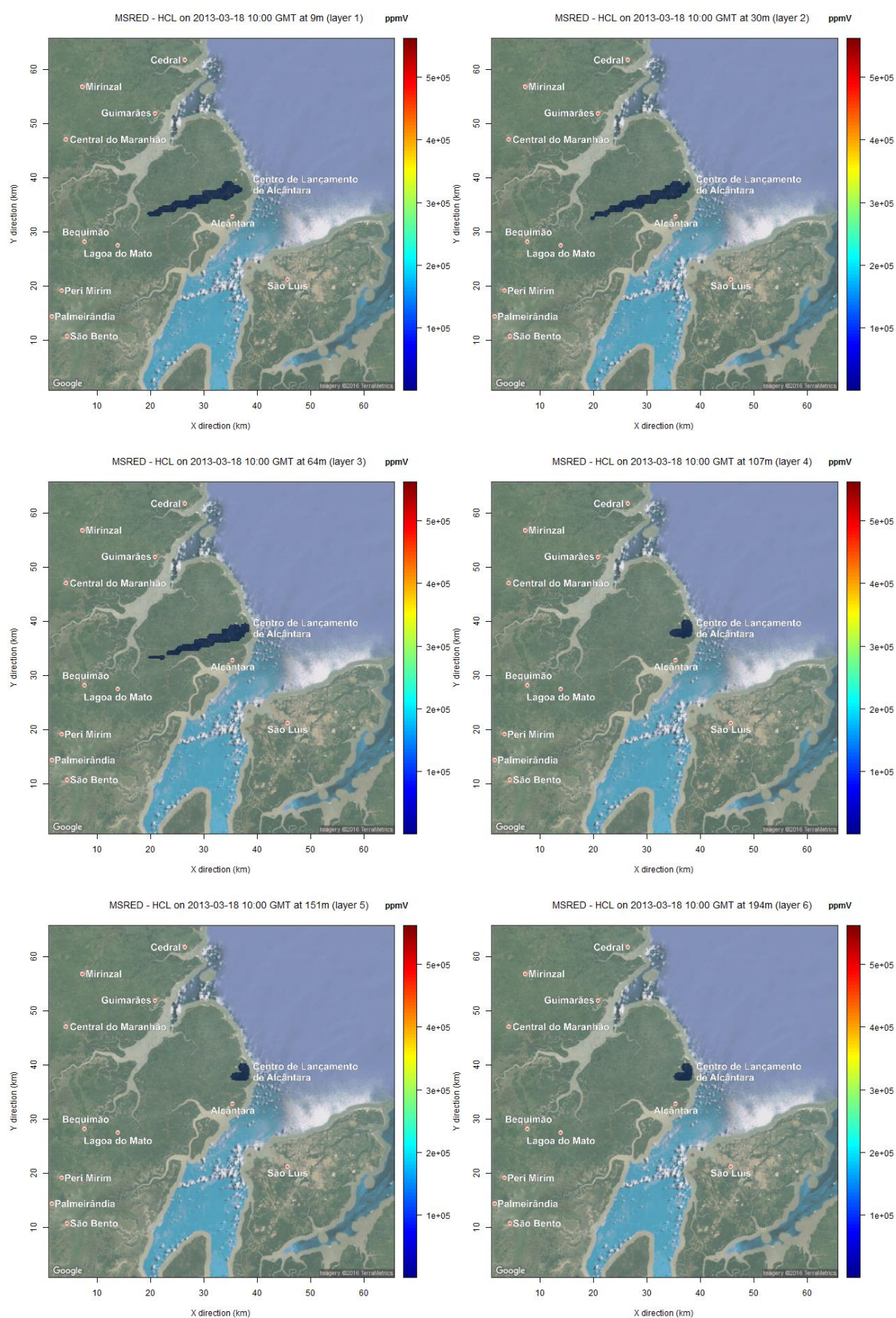


Figura 42: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento normal e condição neutra.

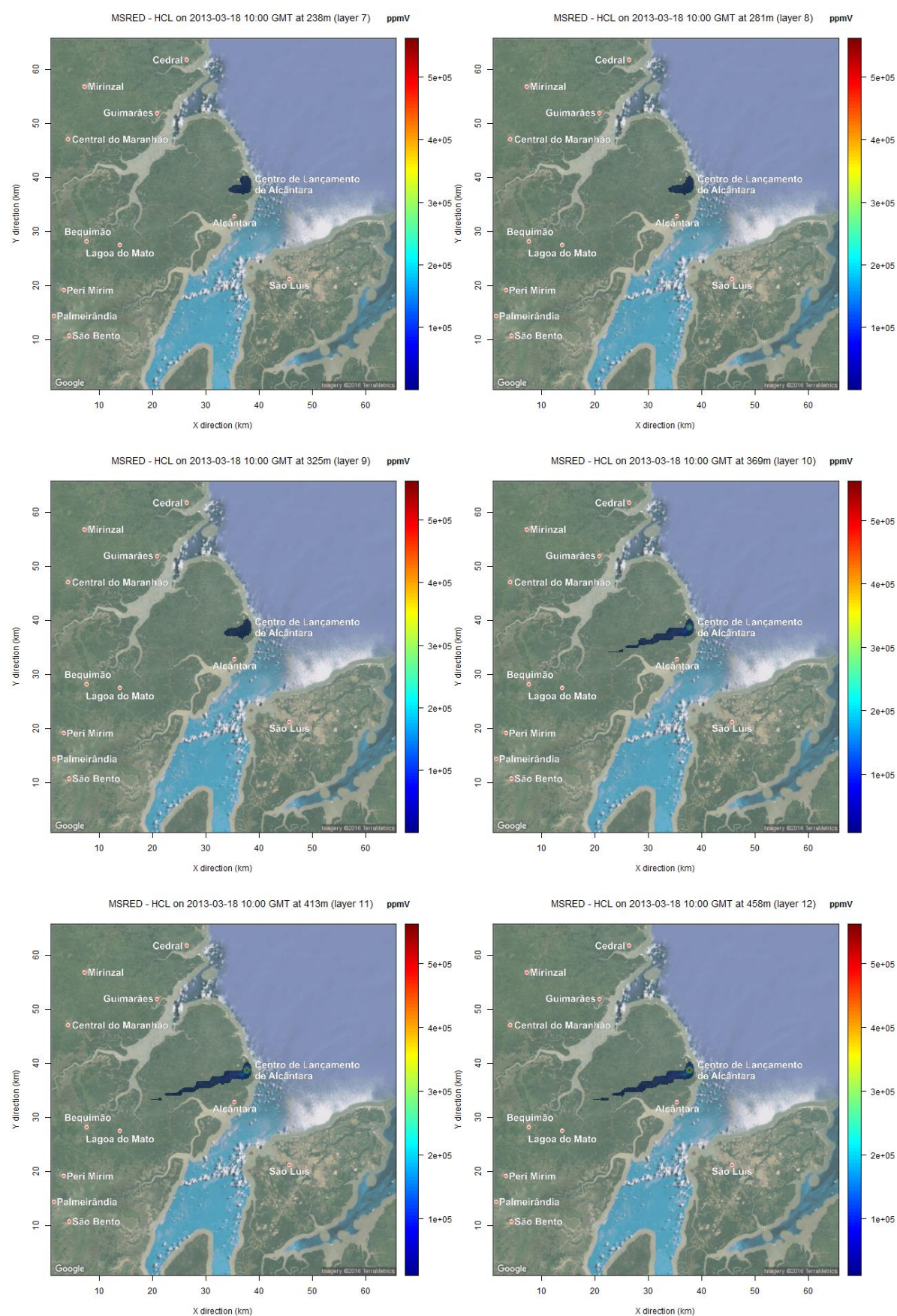


Figura 42: Continuação.

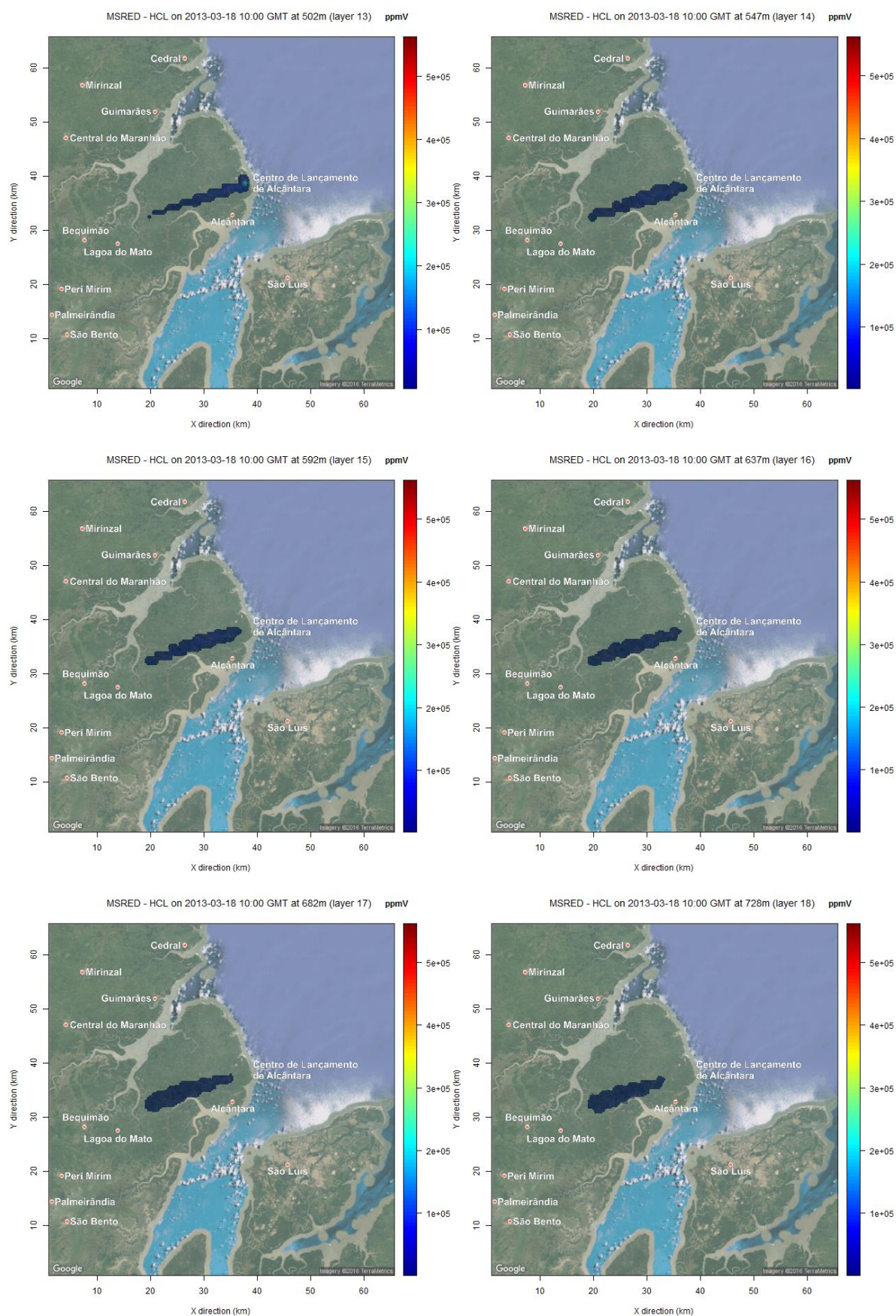


Figura 42: Continuação.

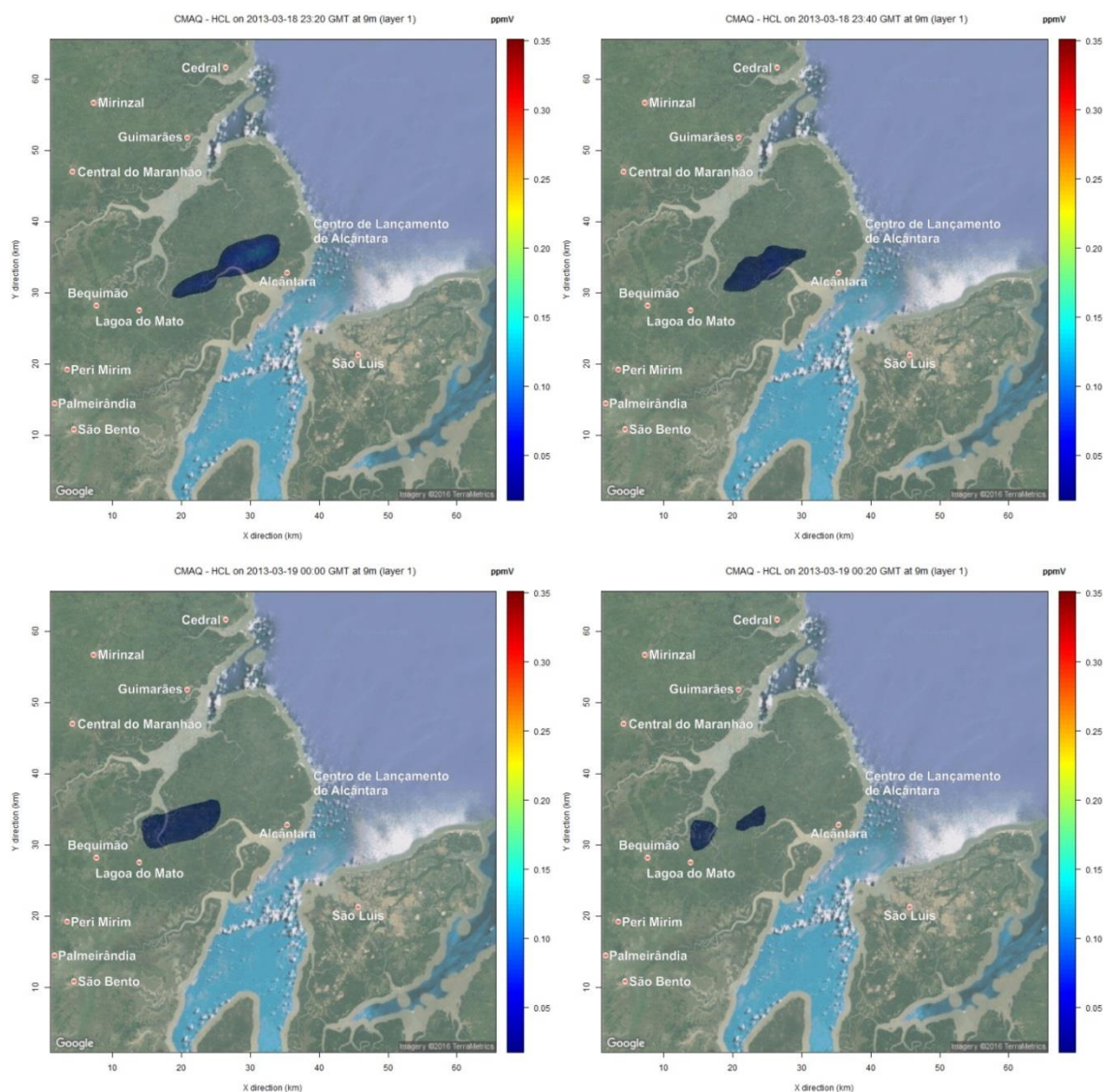


Figura 43: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento normal, condição neutra, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.

Os próximos cenários que serão apresentados se referem à simulação de um caso hipotético de lançamento abortado ou explosão do VLS no CLA, em diferentes condições de estabilidade atmosférica. Para este fim, foram utilizados os valores da Tabela 3 (Seção 4.2.4) para o caso de lançamento abortado, ou seja, calor liberado pelo foguete igual a 1.000 cal/g, taxa de emissão total igual a 136 kg/s com tempo de queima do combustível de 300s. A Figura 44 apresenta o cenário da modelagem com o MSRED com intervalo de 20 minutos em condição atmosférica instável para o caso de lançamento abortado.

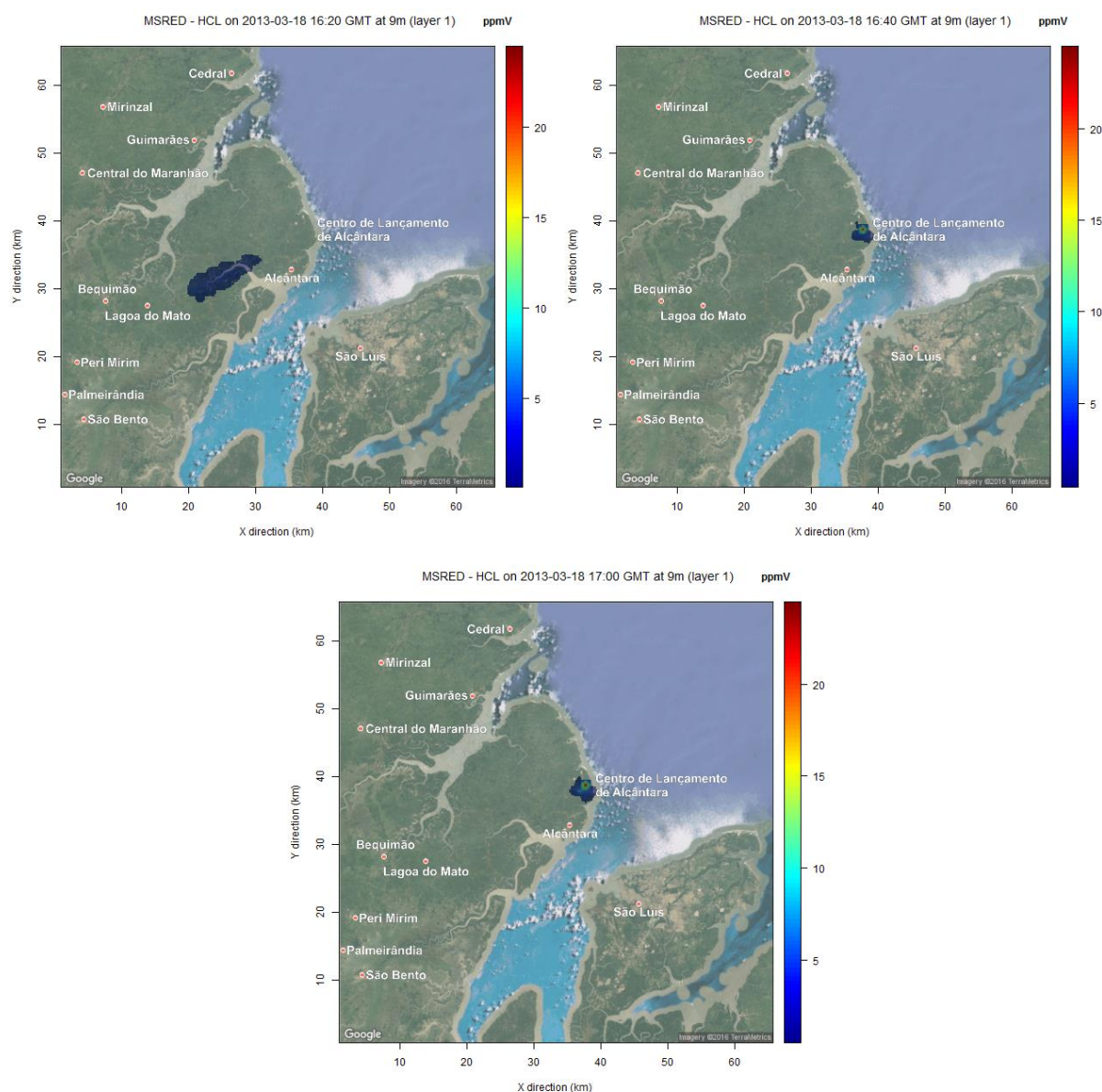


Figura 44: Cenário de concentração do poluente HCl com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento abortado e condição instável.

A seguir, é apresentado na Figura 45, o cenário de concentração média da primeira hora após o lançamento, para este mesmo caso de lançamento abortado e condição atmosférica instável. Como nos outros casos, este é o cenário que representa as condições iniciais para entrada no modelo CMAQ, cujo cenário de modelagem do transporte químico será apresentado na Figura 46, com média de 20 minutos para o contaminante HCl.

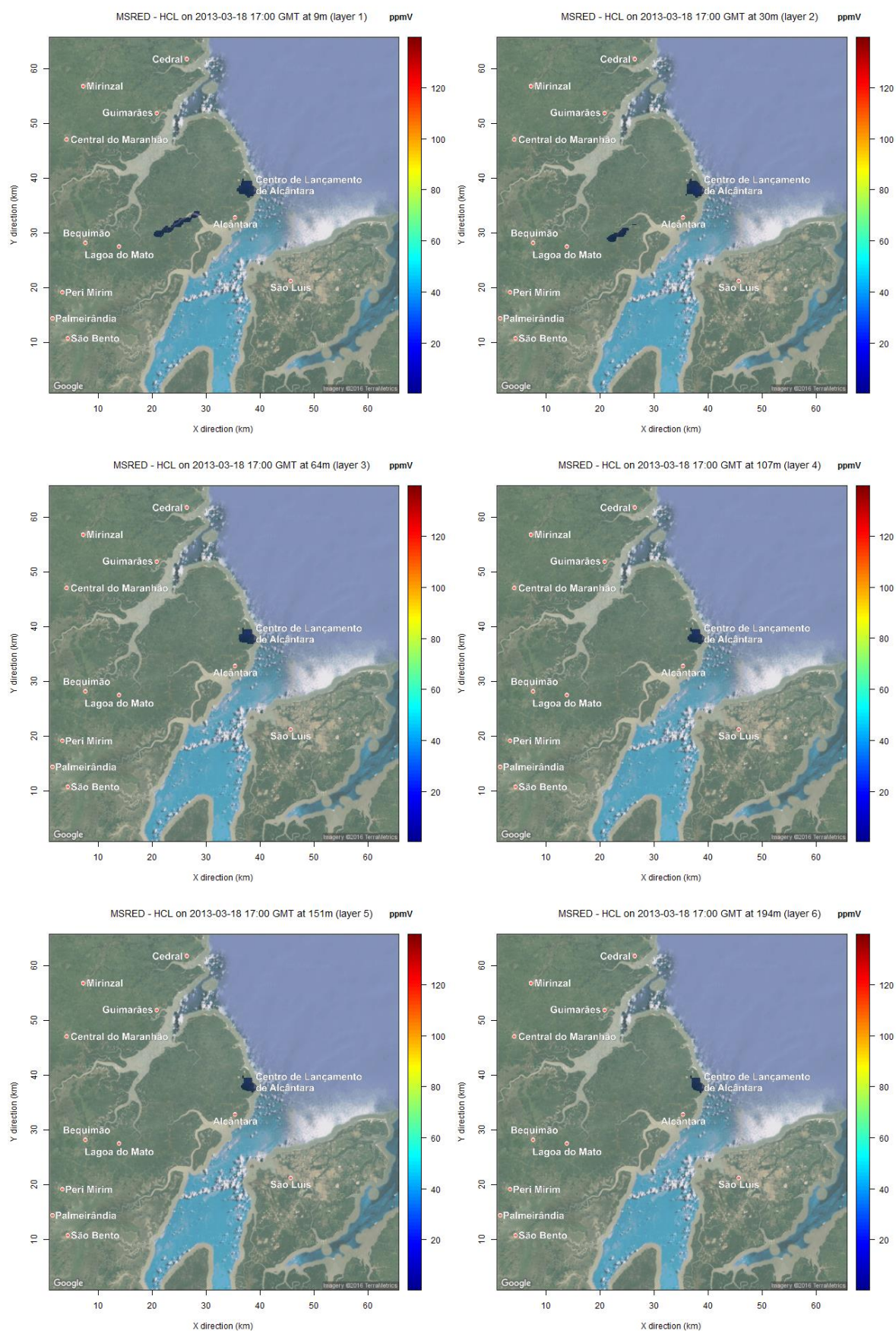


Figura 45: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento abortado e condição instável.

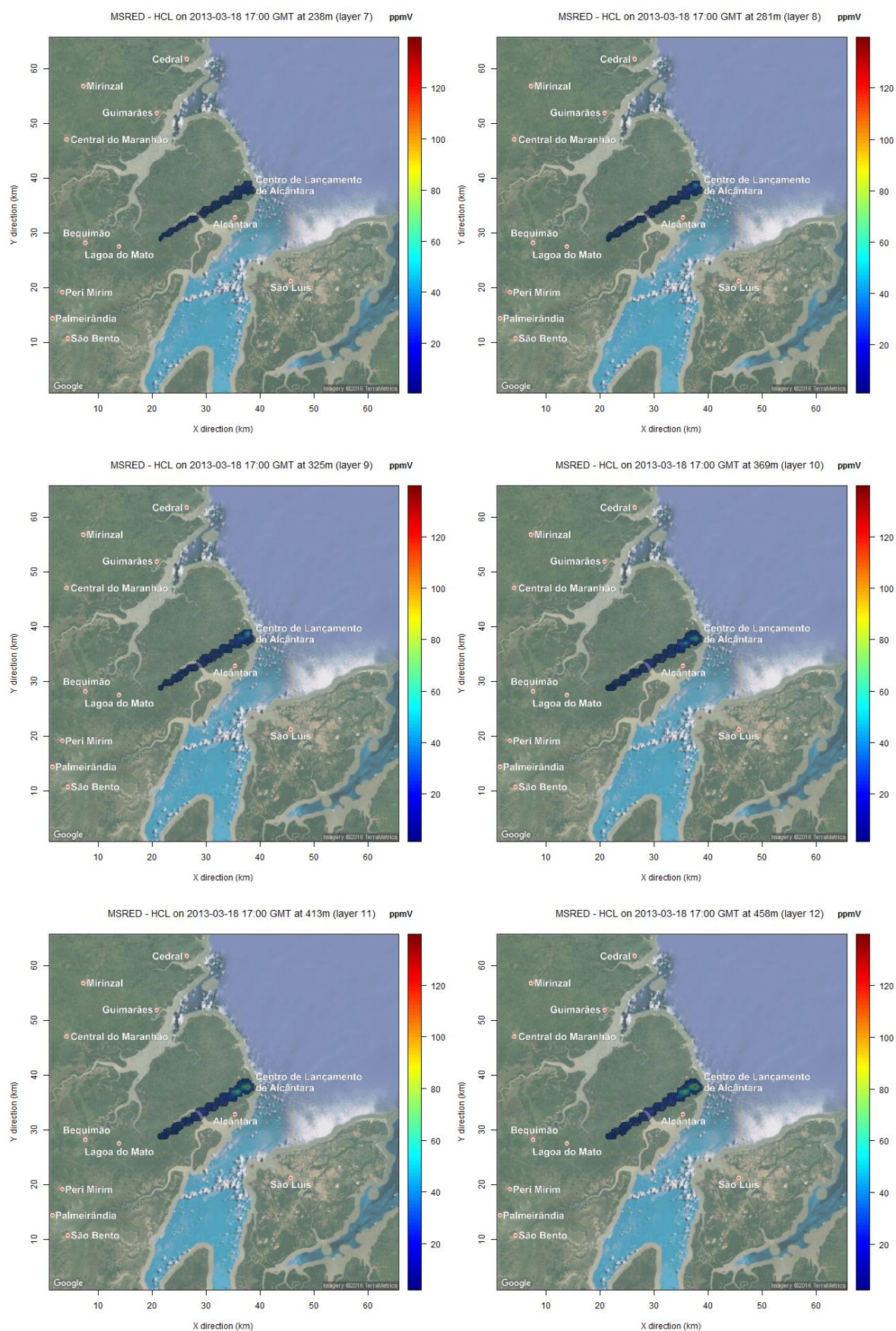


Figura 45: Continuação.

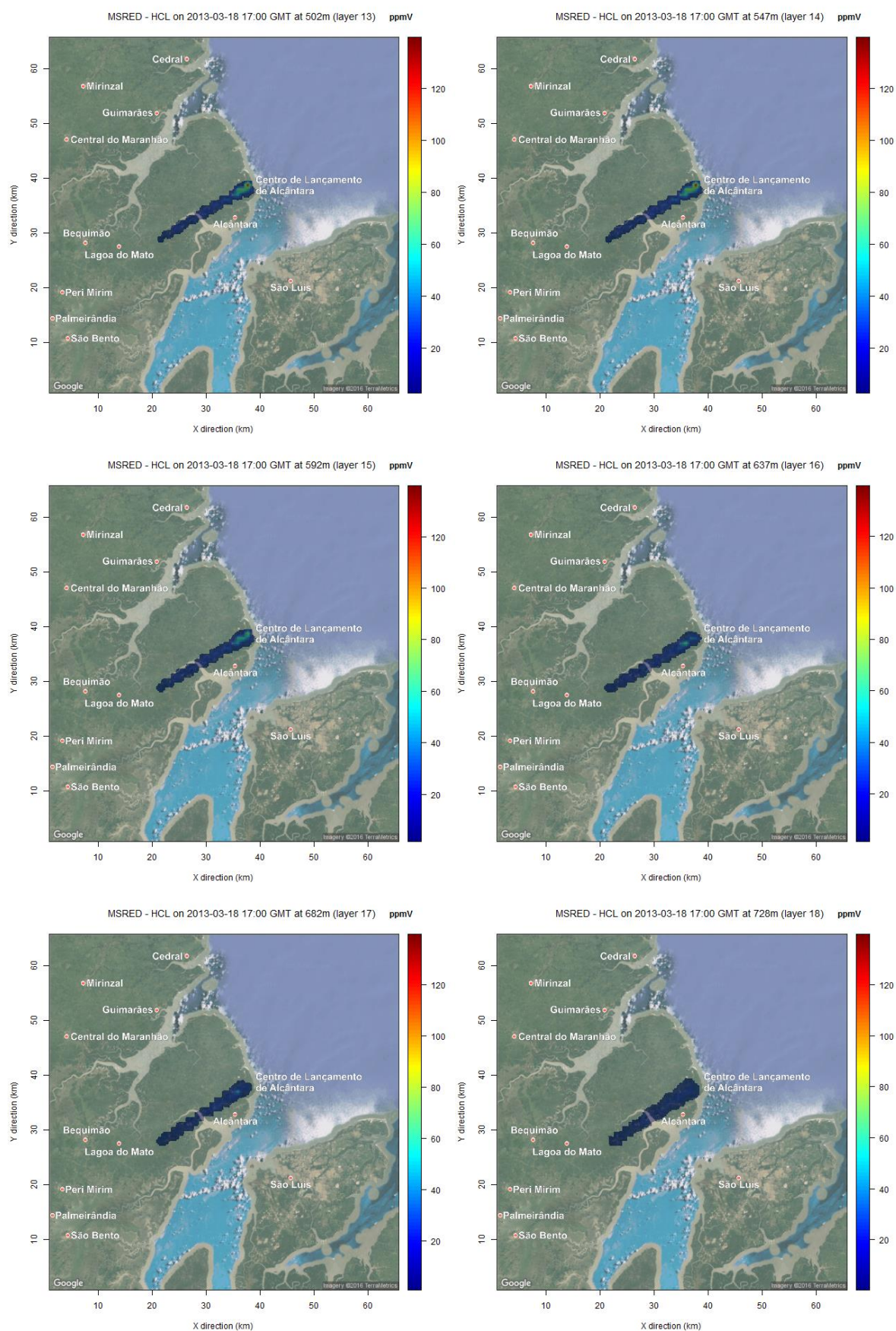


Figura 45: Continuação.

Comparando o cenário de lançamento normal com este, para a condição atmosférica instável, percebe-se que as concentrações do contaminante são maiores neste cenário do que no cenário de lançamento normal. Embora a taxa de emissão seja menor, a nuvem de exaustão alcançou uma altura de ascensão menor que no caso de lançamento normal devido à menor quantidade de calor total do combustível. E, já que o formato da nuvem neste caso é cilíndrico, uma maior quantidade de massa é emitida logo nas primeiras partições da nuvem, se comparado com a nuvem formada no caso de lançamento normal, e isso por sua vez contribui para o aumento das concentrações ao nível da superfície.

O cenário da modelagem com o CMAQ também apresenta esse mesmo comportamento, em que as concentrações neste caso são maiores do que no caso de lançamento normal, conforme se pode constatar analisando a Figura 35. Verifica-se, mais uma vez, a importância da utilização de uma abordagem híbrida e de um sistema de modelagem integrado na avaliação operacional do impacto da nuvem de exaustão de foguetes, simulando o efeito de lançamentos normais e abortados em atividades de planejamento de missões pré-lançamento e de análise ambiental pós-lançamento, missões de testes de planos de emergência e em tomada de decisão para posicionamento de rede de monitoramento ambiental.

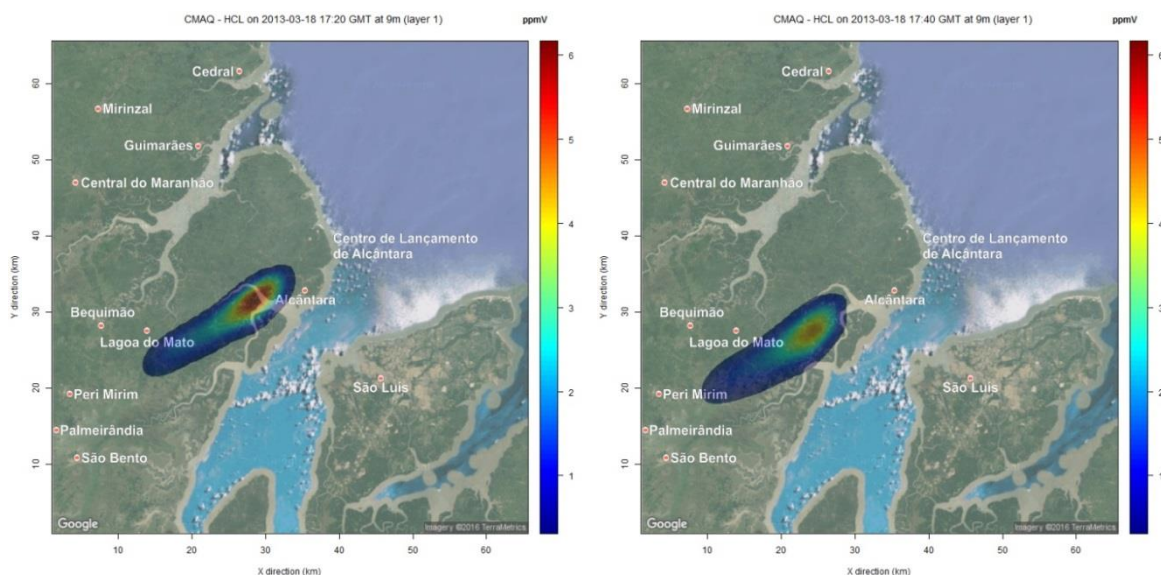


Figura 46: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento abortado, condição instável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.

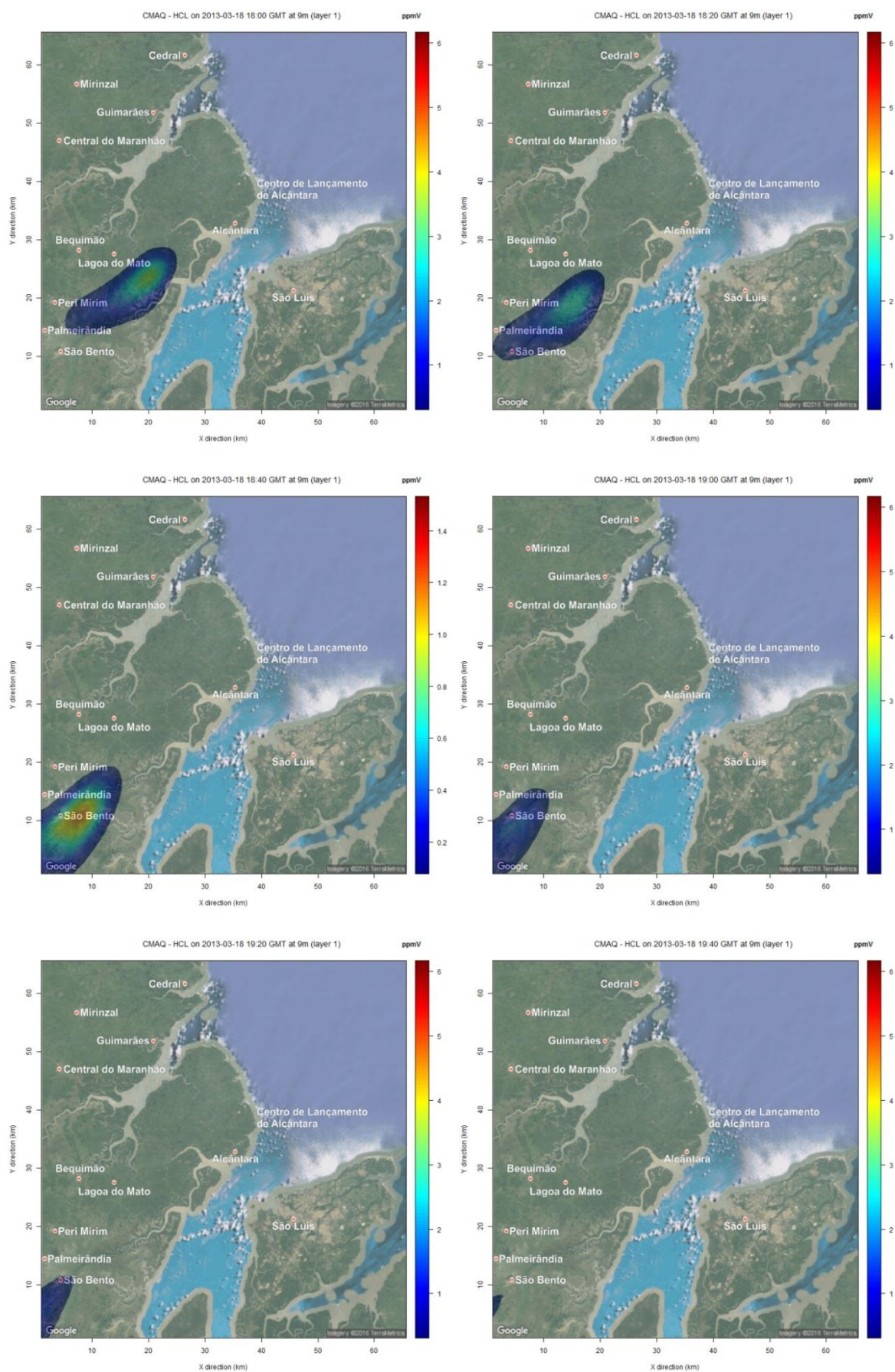


Figura 46: Continuação.

O próximo cenário a ser apresentado se refere à modelagem com o MSRED com intervalo de cálculo da concentração de 20 minutos em condição atmosférica estável para o caso de lançamento abortado (Figura 47). Enquanto que no cenário de lançamento normal a base da nuvem se encontrava a uma altura de 127m, neste caso a base da nuvem está a uma altura de 293m, 166m mais alta que no caso normal. Isso, consequentemente, leva a concentrações menores ao nível da superfície neste caso, quando comparado com o cenário de lançamento normal.

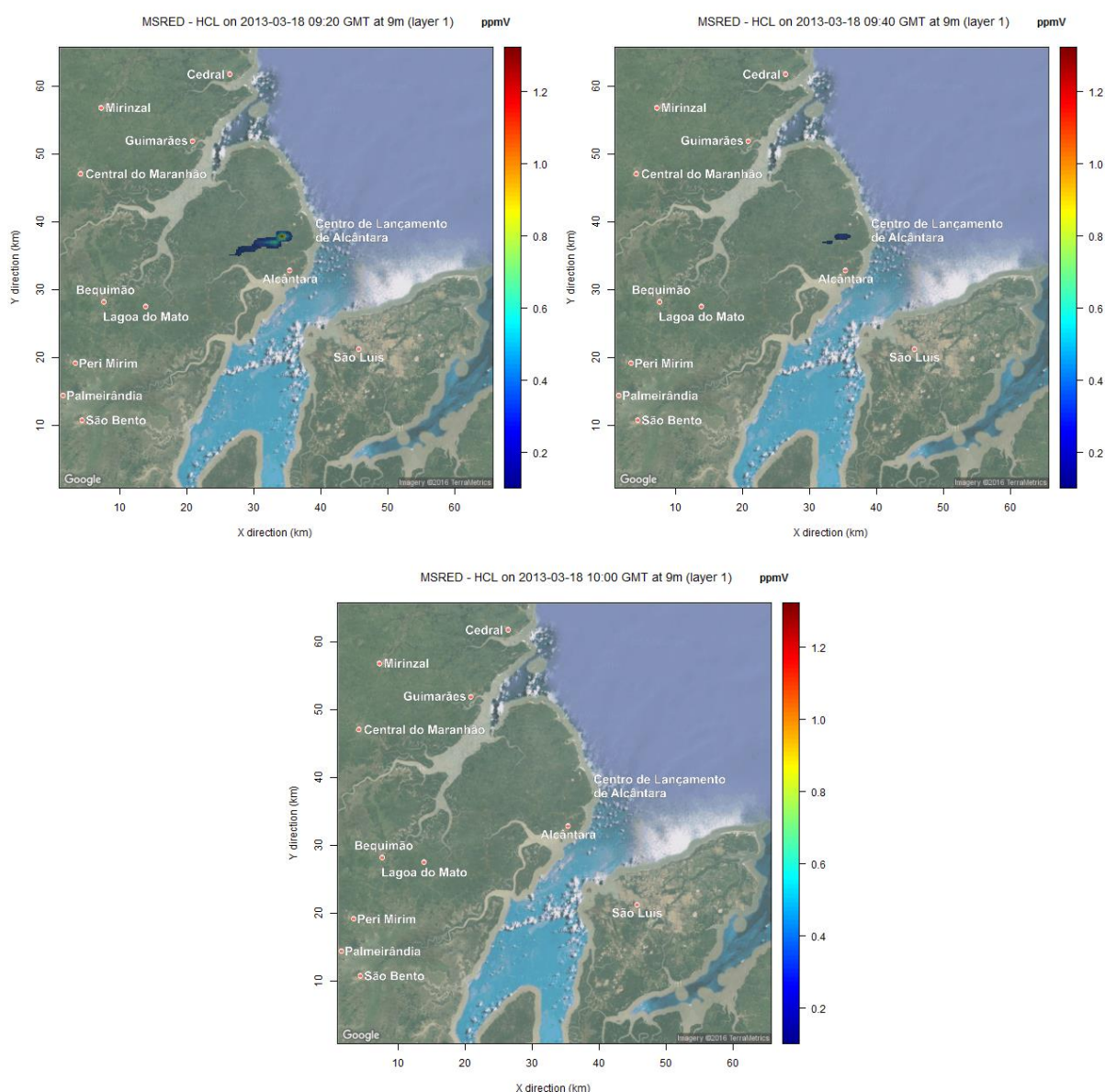


Figura 47: Cenário de concentração do poluente HCL com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento abortado e condição estável.

O próximo cenário a ser apresentado (Figura 48) se refere à média da primeira hora modelada pelo MSRED para entrada de condições iniciais no CMAQ, em condição

atmosférica estável para o caso de lançamento abortado. As concentrações são menores na região mais próxima à superfície, no entanto elas aumentam a valores bem altos nos níveis em que há emissões em função das partições das nuvens.

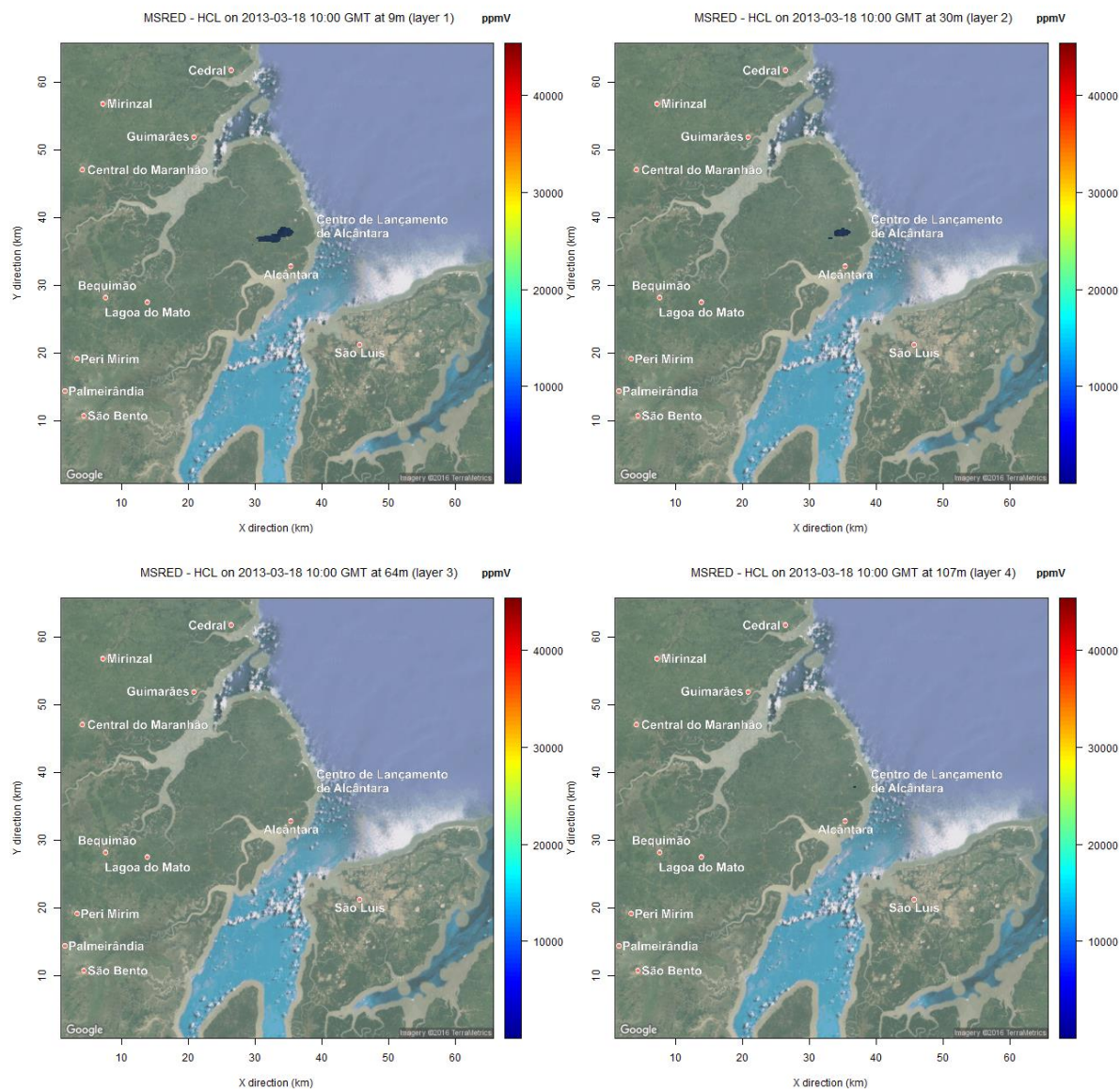


Figura 48: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento abortado e condição estável.

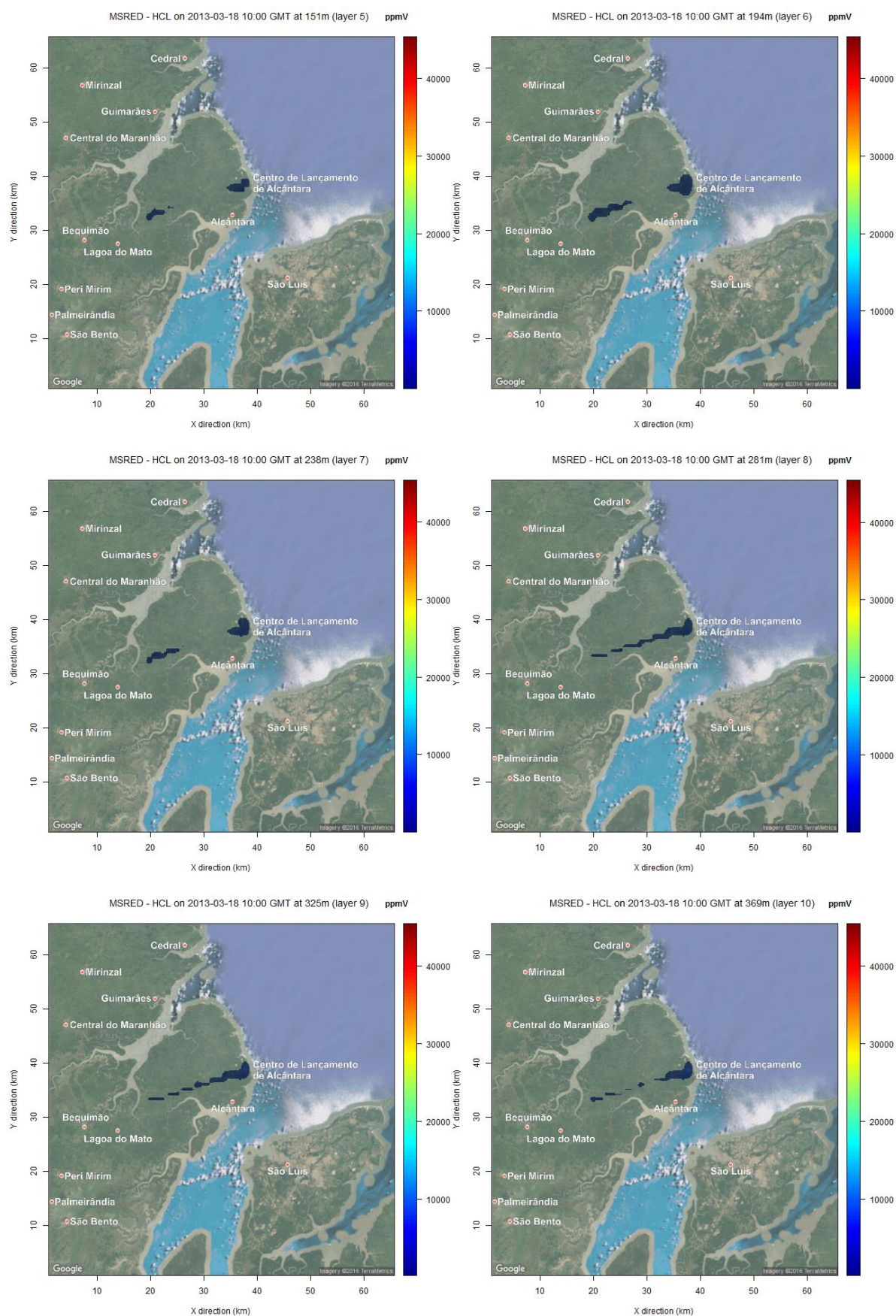


Figura 48: Continuação.

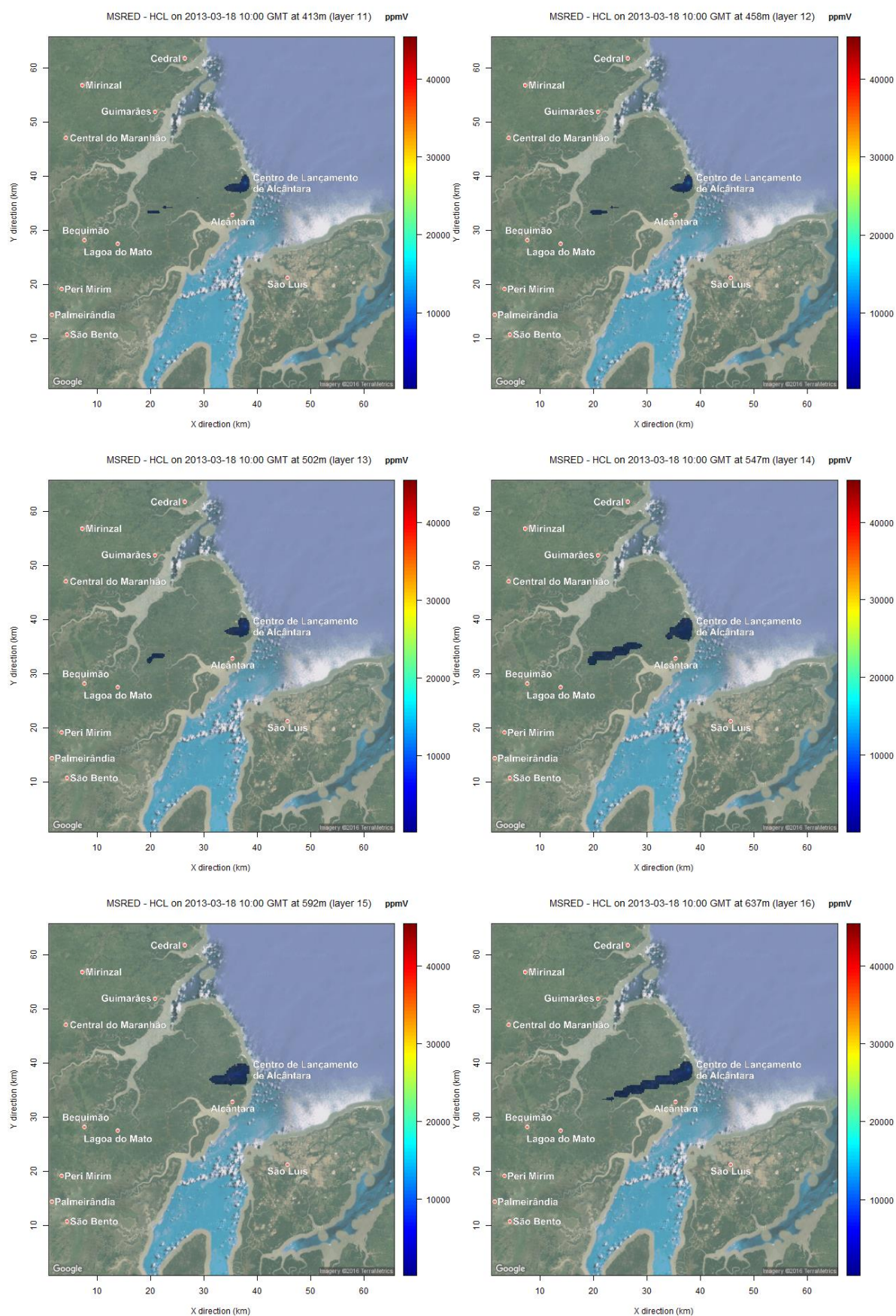


Figura 48: Continuação.

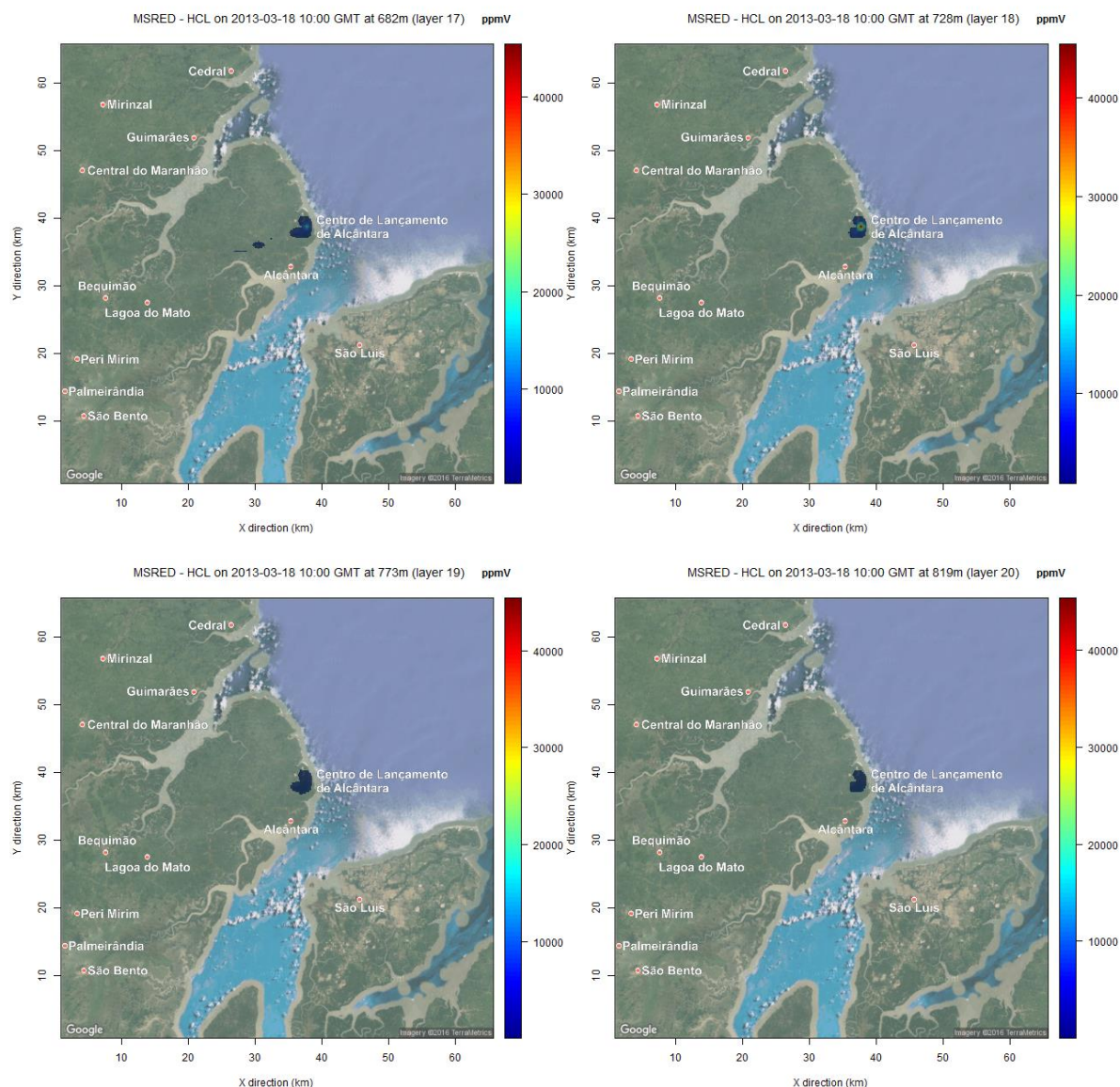


Figura 48: Continuação.

Estas condições iniciais foram então utilizadas para a modelagem do transporte químico de longo alcance com o CMAQ, cujo cenário é apresentado na Figura 49. Semelhantemente ao caso de lançamento normal e condição atmosférica estável, as concentrações neste cenário foram as maiores reportadas pelo modelo para o caso de lançamento abortado. Porém, não apresentaram valores tão altos quanto no caso normal, embora ainda sejam valores de concentração com o potencial de causar danos à saúde ou à vida humana. As cidades que se encontram a oeste do CLA seriam, neste caso, as mais impactadas pela nuvem de exaustão.

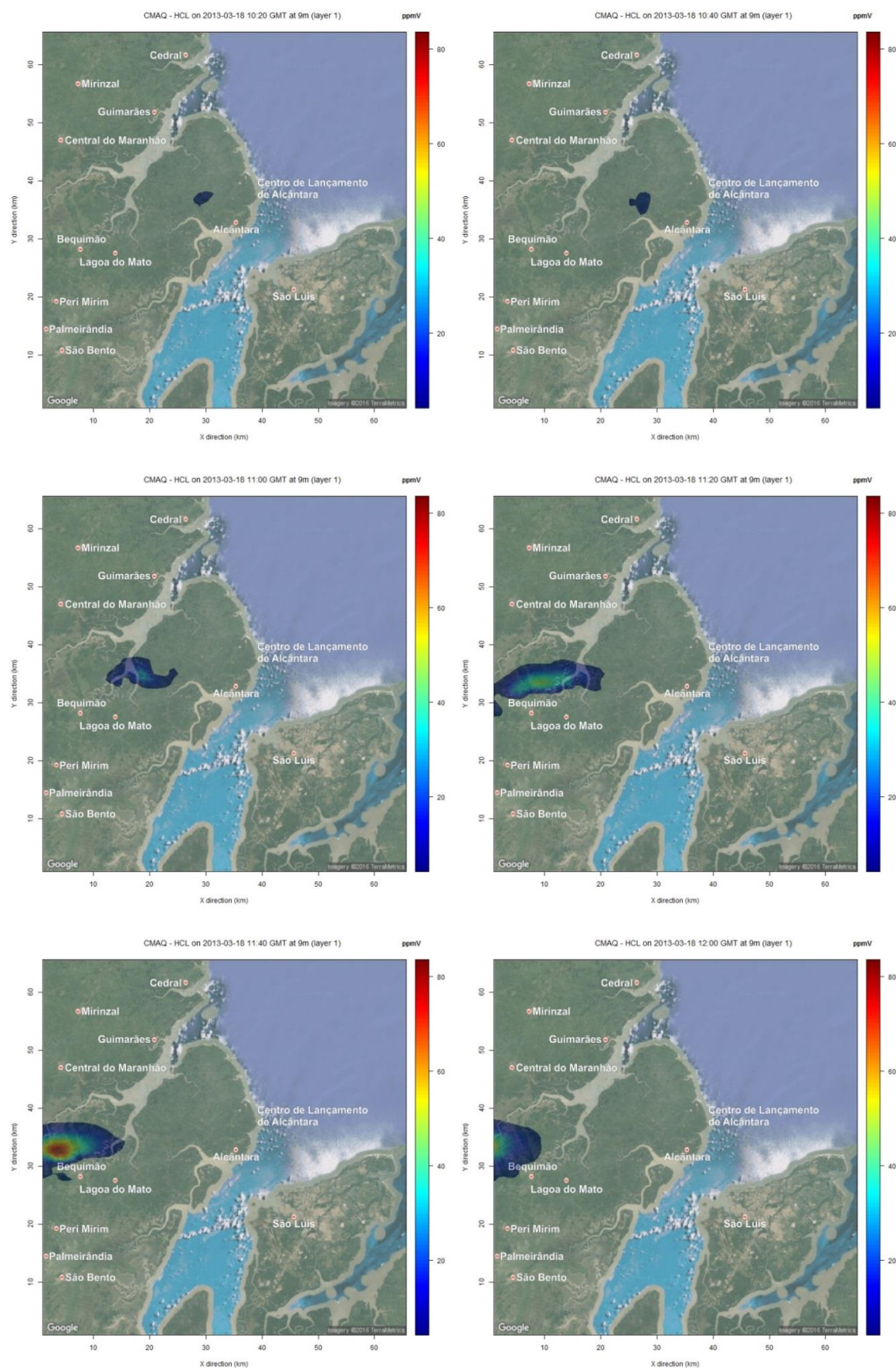


Figura 49: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento abortado, condição estável, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.

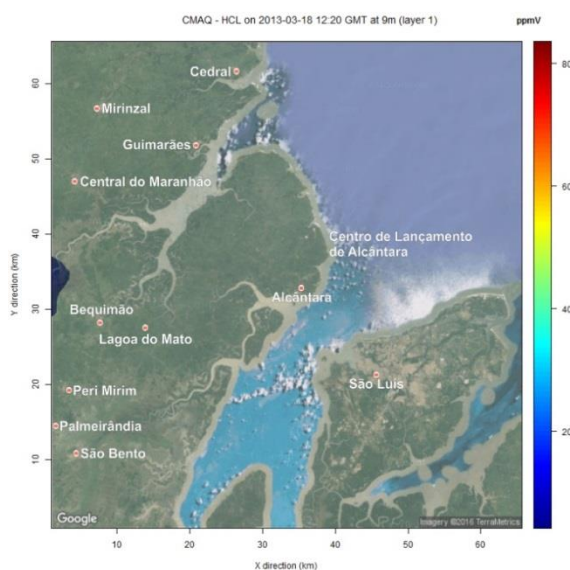


Figura 49: Continuação.

Por último, será apresentado o cenário da modelagem com o MSRED e o CMAQ para a avaliação de curto e longo alcance, respectivamente, do impacto no ar ambiente da nuvem de exaustão de foguete no caso de um lançamento abortado hipotético em condição atmosférica neutra. A Figura 50 apresenta o cenário da modelagem com o MSRED com intervalo de 20 minutos em condição atmosférica neutra para o caso de lançamento abortado.

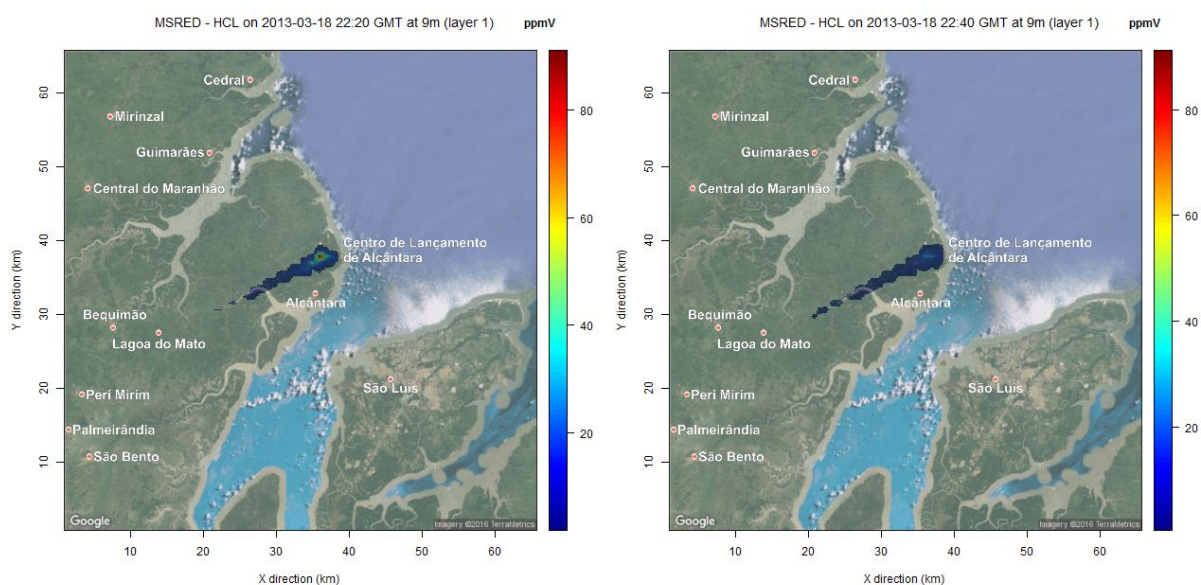


Figura 50: Cenário de concentração do poluente HCL com intervalo de 20min modelado pelo MSRED para o caso de lançamento abortado e condição neutra.

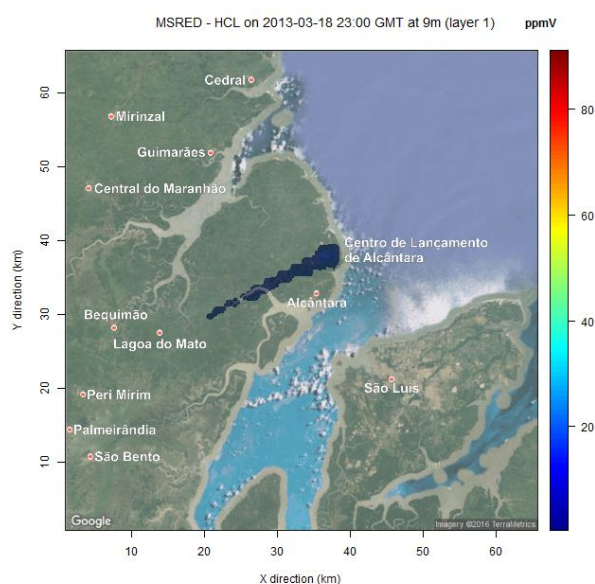


Figura 50: Continuação.

Na Figura 51 é mostrado o cenário modelado pelo MSRED referente à média da primeira hora, em condição atmosférica neutra para o caso de lançamento abortado, utilizado pelo CMAQ como entrada de condições iniciais. Nos primeiros 20 minutos, as concentrações atingem valores altos, mas que diminuem ao longo dos 40 minutos seguintes, permanecendo, porém, em níveis perigosos, com potencial de causar dano à saúde.

Para entrada no CMAQ, foi gerado o campo de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED para este caso, conforme é apresentado na Figura 51. Comparando tanto o cenário de concentração instantânea de 20 minutos (Figura 50) quanto o cenário de concentração média da primeira hora (Figura 51) com os respectivos cenários modelados no caso de lançamento normal para condição neutra (Figuras 41 e 42, respectivamente), percebe-se que neste caso os valores de concentração são bem maiores do que no primeiro caso.

O aspecto principal que leva a essa discrepância é a distribuição e formato da nuvem, pois apesar de ambas possuírem praticamente a mesma altura da base da nuvem, as partições mais inferiores, no caso abortado, possuem uma quantidade de massa muito maior do que as partições equivalentes do caso de lançamento normal.

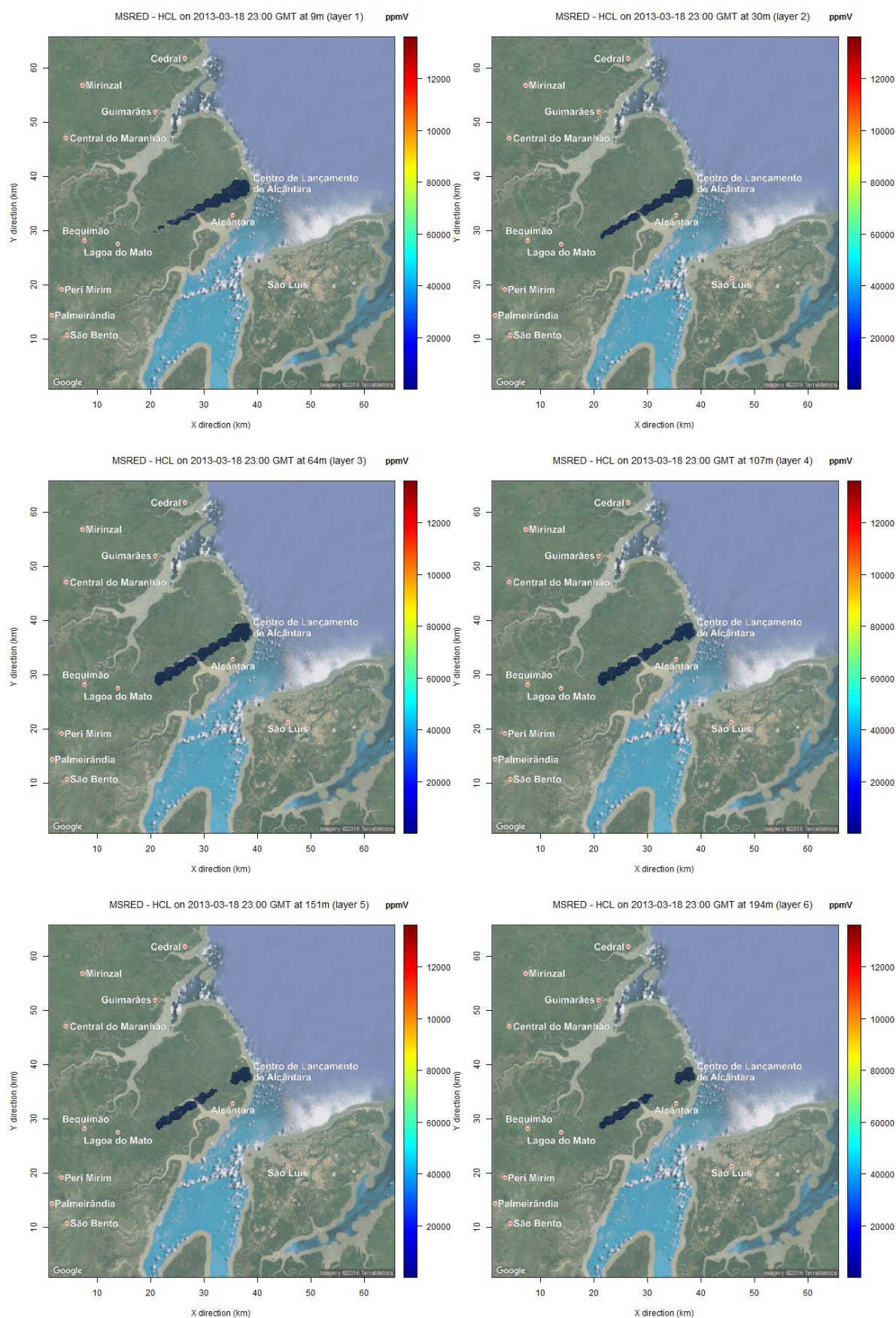


Figura 51: Cenário de concentração média da primeira hora modelado pelo MSRED do poluente HCl para cada nível vertical, para o caso de lançamento abortado e condição neutra.

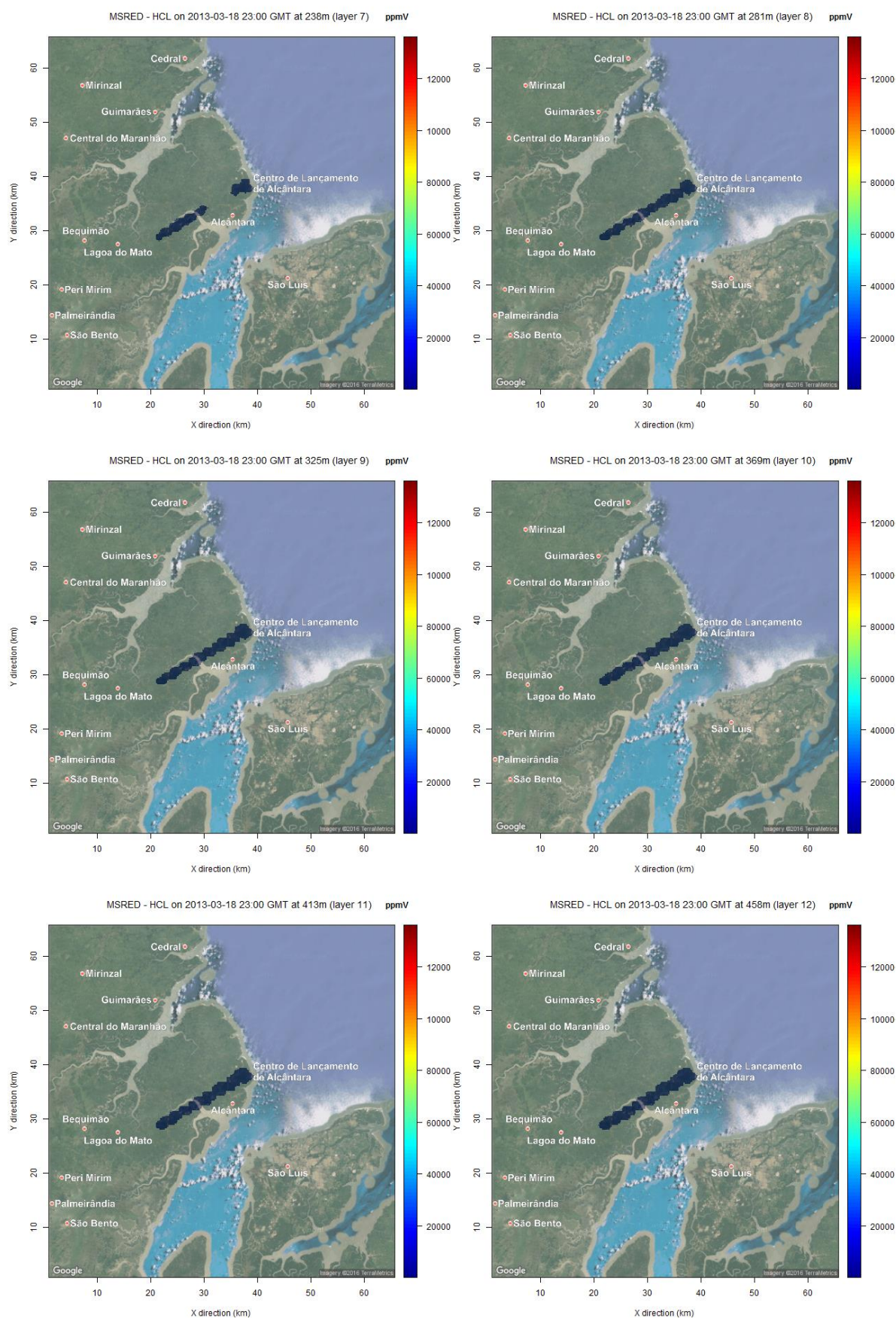


Figura 51: Continuação.

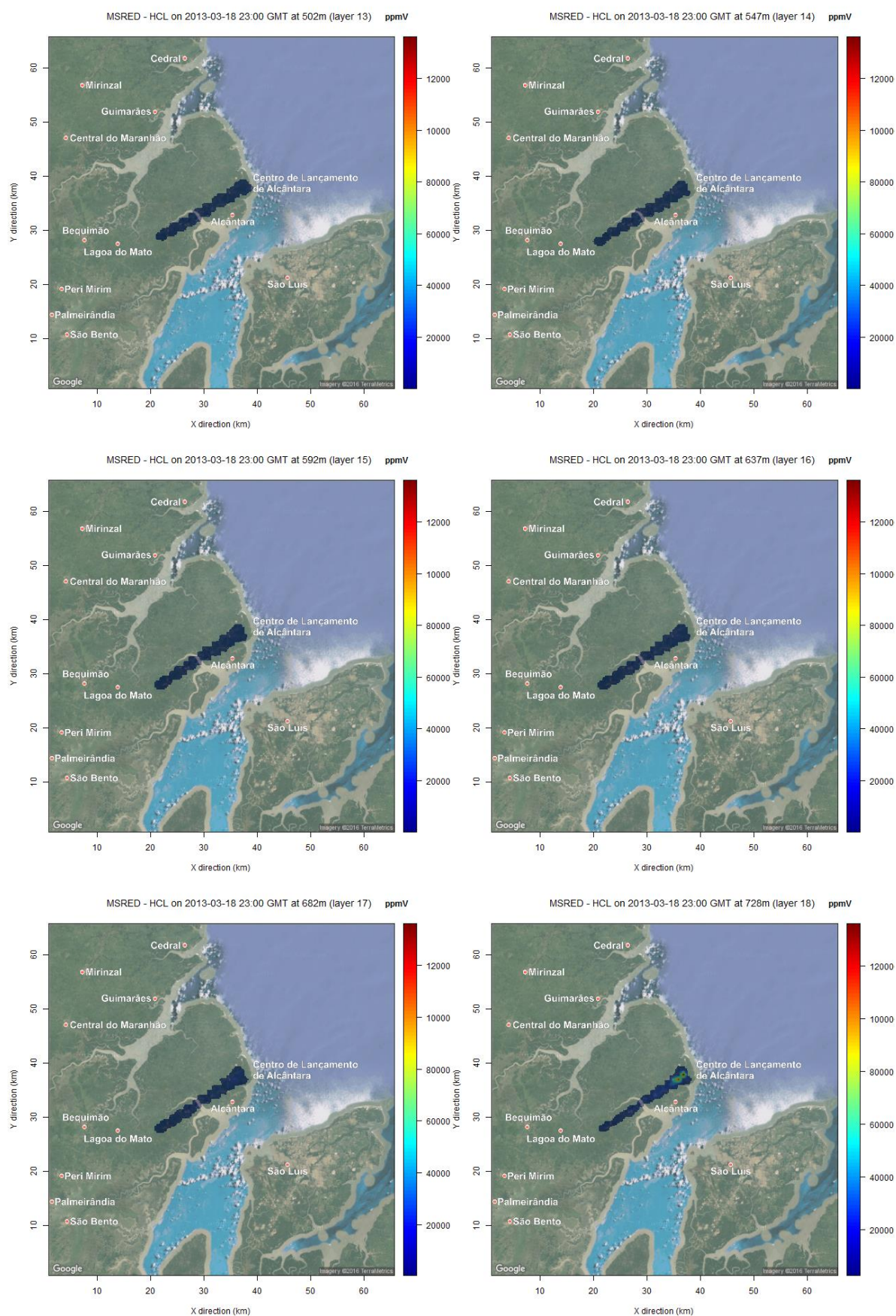


Figura 51: Continuação.

A Figura 52 apresenta a seguir o cenário da modelagem com o CMAQ, utilizando as condições iniciais geradas pelo MSRED para este caso (lançamento abortado e condição atmosférica neutra). É possível notar que as concentrações permaneceram em níveis mais baixos do que os apresentados no cenário de condição estável, porém um pouco maiores do que no caso instável.

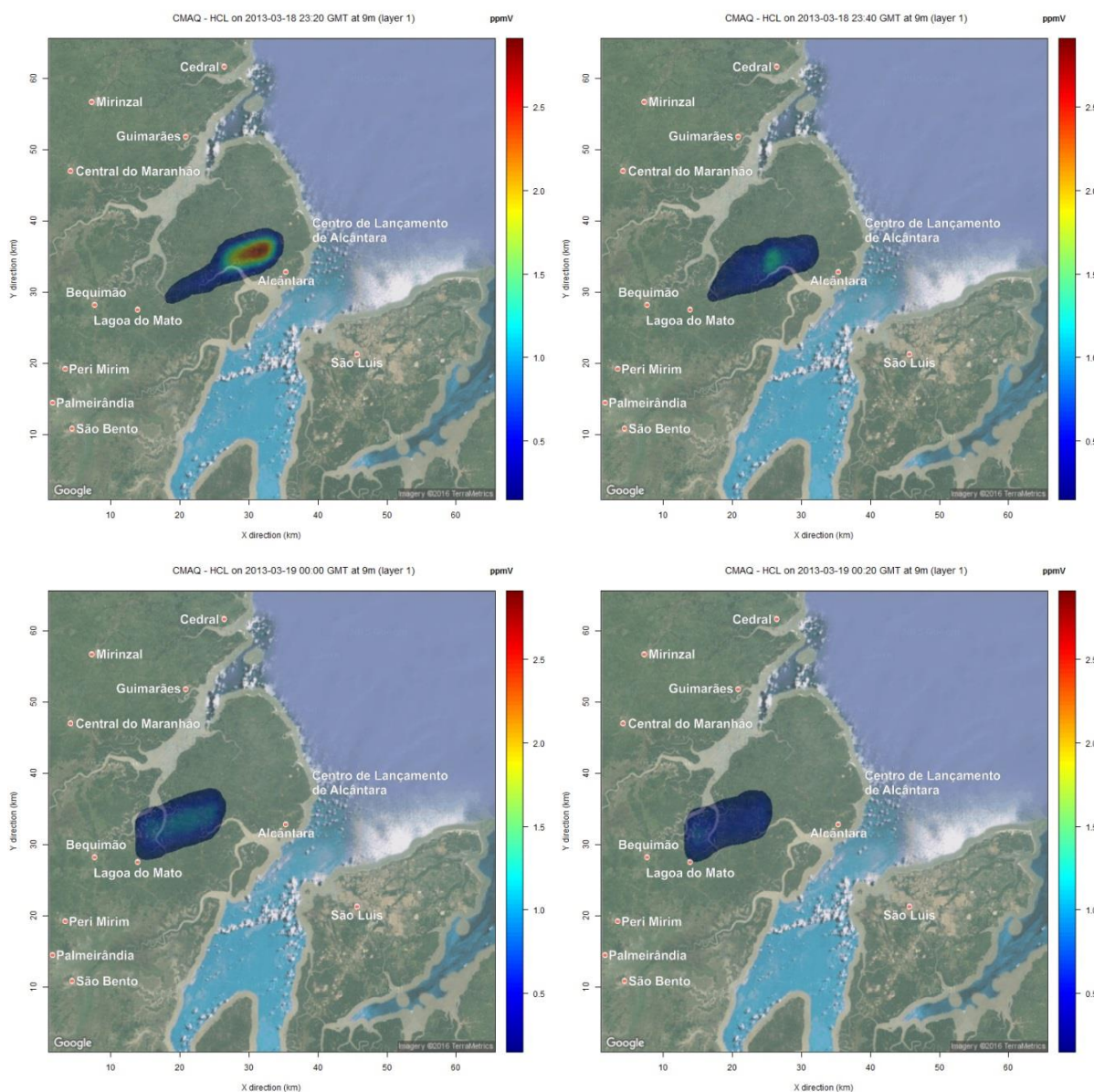


Figura 52: Cenário de concentração média de 20min do poluente HCl modelado pelo CMAQ para o caso de lançamento abortado, condição neutra, usando as condições iniciais geradas pelo MSRED.

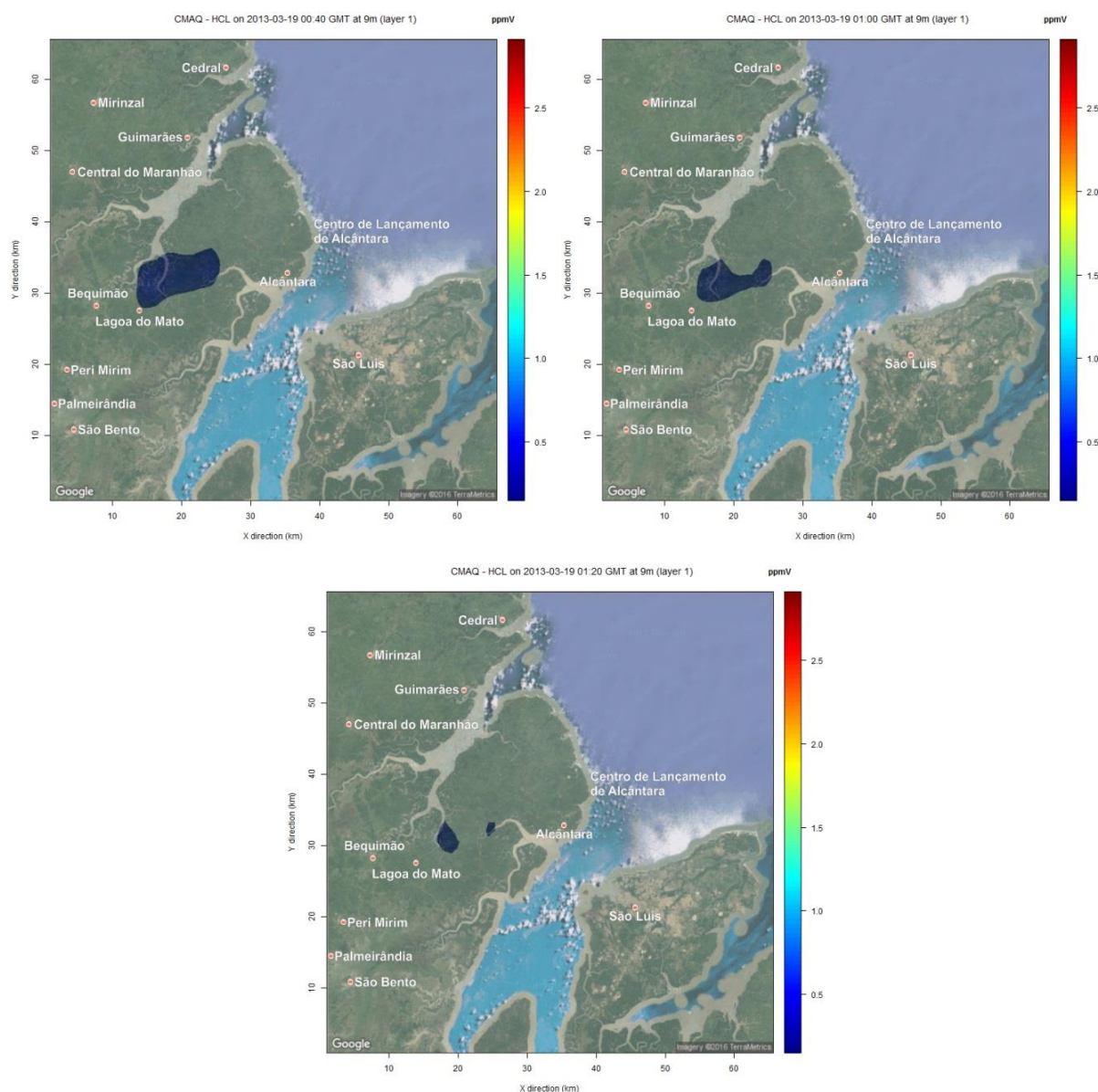


Figura 52: Continuação.

5.3.4 Desempenho do Paralelismo

As figuras a seguir apresentam uma análise gráfica do desempenho do mecanismo de paralelismo computacional que foi projetado e desenvolvido no MSRED. Para esta análise, foi medido o tempo de processamento (em segundos) do cálculo da concentração para cada ponto receptor da grade devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão, utilizando diferentes quantidades de processadores. A Figura 53 apresenta o gráfico de redução percentual do tempo de processamento na medida em que se aumenta o número de processadores. A Figura 54, por sua vez, apresenta a análise gráfica do *speedup* do MSRED.

O *speedup* é uma medida do grau de desempenho, que mede a razão entre o tempo de execução sequencial e o tempo de execução em paralelo:

$$S_p(n_p) = \frac{T_e(1)}{T_e(n_p)} \quad (98)$$

onde n_p é o número de processadores, $S_p(n_p)$ é o *speedup*, e $T_e(n_p)$ é o tempo de execução do modelo para n_p processadores. O desempenho tende a ser ideal quando o *speedup* se aproxima de n_p .

Outra medida importante é a eficiência (E_p), que trata da relação entre o *speedup* e o número de processadores:

$$E_p(n_p) = \frac{S_p(n_p)}{n_p} \quad (99)$$

No caso ideal ($speedup = n_p$), a eficiência seria máxima e teria valor 1 (100%). Seu gráfico é apresentado na Figura 55.

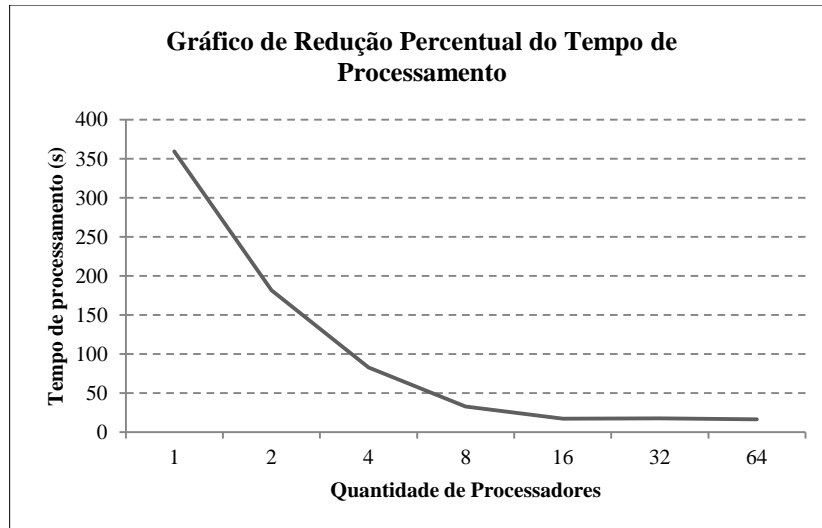


Figura 53: Desempenho do paralelismo implementado no MSRED medido pelo tempo de processamento (em segundos) do cálculo da concentração devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão em função da quantidade de processadores.

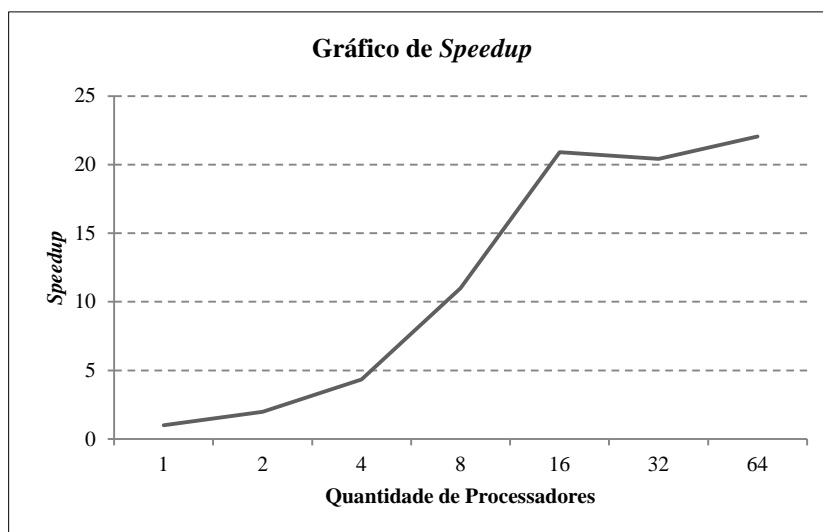


Figura 54: *Speedup* do paralelismo implementado no MSRED medido pelo tempo de processamento (em segundos) do cálculo da concentração devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão em função da quantidade de processadores.

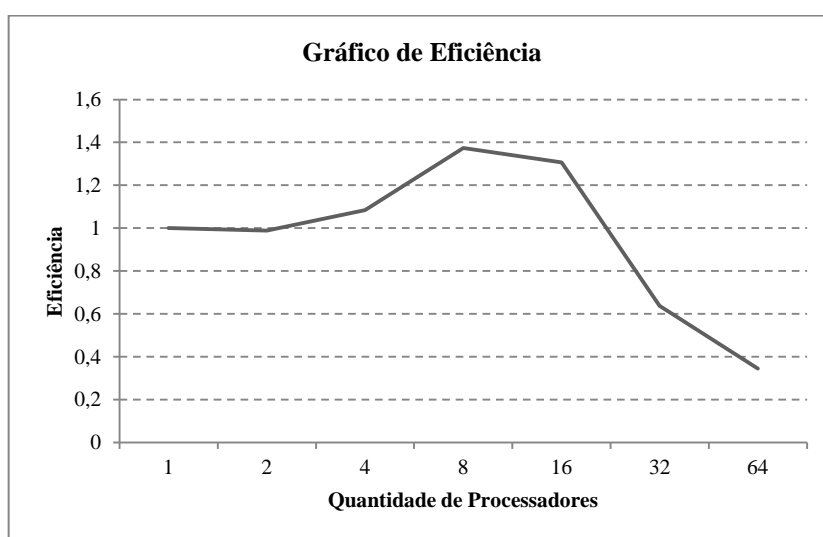


Figura 55: Eficiência do paralelismo implementado no MSRED medido pelo tempo de processamento (em segundos) do cálculo da concentração devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão em função da quantidade de processadores.

A Tabela 17, por sua vez, apresenta os valores do tempo de processamento para cada conjunto de processadores, juntamente com a redução percentual, o *speedup* e a eficiência. Os testes foram feitos utilizando computadores Intel Xeon 64 bits de 8 núcleos com 2,133 GHz cada, e 8 GB de memória RAM.

Tabela 17: Tempo de processamento da concentração devido à emissão de uma partição da nuvem de exaustão para cada conjunto de processadores.

Quantidade de processadores	1	2	4	8	16	32	64
Tempo de processamento (s)	359,4	181,8	82,9	32,7	17,2	17,6	16,3
Redução (%)	-	49,4	54,4	60,6	47,4	-2,3	7,4
Speedup	1	2,0	4,3	11,0	20,9	20,4	22,0
Eficiência	1	1,0	1,1	1,4	1,3	0,6	0,3

Analisando os indicadores de desempenho apresentados, é possível constatar que, na medida em que se dobra a quantidade de processadores, o tempo de processamento reduz aproximadamente à metade, e em alguns casos, até mais do que à metade, de modo que o tempo de processamento do modelo é inversamente proporcional à quantidade de processadores alocados para sua execução. Isto evidencia a propriedade do modelo MSRED de ser escalável, ou seja, de prover mais desempenho na medida em que lhe é adicionada mais capacidade. No entanto, constata-se também que, conforme o número de processadores aumenta muito, a redução quase já não mais ocorre, estabilizando o tempo de processamento em um valor aproximadamente constante. Isto ocorre quando há mais processadores disponíveis para a execução do modelo do que subdivisões da grade receptora, nos casos em que se alcança uma quantidade de processadores maior ou igual à quantidade de pontos receptores na direção x , que é o fundamento da estratégia de divisão do esforço computacional do modelo MSRED.

6. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Este trabalho apresentou um tema atual no campo de pesquisa das ciências atmosféricas, referente ao desenvolvimento de ferramentas computacionais para a simulação da dispersão de gases liberados por veículos espaciais no Centro de Lançamento de Alcântara. Como foi apresentado na introdução desta tese, não existe atualmente um sistema de modelagem atmosférica capaz de simular o impacto da grande nuvem de exaustão formada durante o lançamento de foguetes na região do CLA. Tendo como base a revisão da literatura apresentada neste trabalho, verificou-se que existem alguns poucos sistemas de modelagem atualmente preparados para lidar com o caso de lançamento de foguetes, no entanto ou não estão disponíveis para a utilização pela comunidade científica, ou não estão devidamente adequados para a aplicação no CLA. Verificou-se, também, que se faz necessária a utilização de abordagens híbridas para a avaliação do impacto de nuvens de exaustão de foguetes em diferentes escalas de tempo e espaço, que sejam capazes de mesclar a modelagem meteorológica com a modelagem de curto alcance da dispersão e a modelagem de longo alcance do transporte químico dos contaminantes emitidos durante o lançamento de um foguete.

Assim, devido à natureza única das emissões de foguetes e às lacunas que existem nesse campo das ciências atmosféricas, foi constatada a necessidade de se desenvolver um novo modelo matemático-computacional capaz de simular tal impacto em escalas de tempo e espaço menores do que as abordagens usuais de modelagem da qualidade do ar estão preparadas para lidar. Este novo modelo foi concebido para se integrar com outros modelos atmosféricos que tenham a habilidade de simular tanto o cenário meteorológico de entrada quanto o transporte químico dos contaminantes para a avaliação de longo alcance, criando, deste modo, a base para um *framework*, ou estrutura de modelagem, preparado para ser utilizado no CLA. Para a modelagem meteorológica, foi escolhido o modelo WRF; e para a modelagem do transporte químico, foi escolhido o modelo CMAQ, pois ambos representam o estado da arte nas suas áreas de atuação.

O novo modelo, denominado MSRED, foi especialmente projetado e desenvolvido para incorporar o estado da arte nas ciências atmosféricas e da computação. Seu desenvolvimento se baseou no trabalho anterior de Moreira et al. (2011), em que foi desenvolvido o modelo MSDEF, mas com diversas melhorias. No que tange aos aspectos computacionais, o modelo foi projetado para se integrar com os modelos WRF e CMAQ,

utilizando as bibliotecas netCDF e I/O API, gerando saídas georreferenciadas, já formatadas para a modelagem do transporte químico de longo alcance com CMAQ e para o pós-processamento com diversas ferramentas capazes de manipular dados no formato netCDF. Ele foi modularizado e desenvolvido para ser executado de forma paralela utilizando técnicas de computação de alto desempenho. O desempenho da aplicação do paralelismo foi medido e avaliado, e seus resultados puderam atestar que a técnica foi aplicada com sucesso, atestando ao modelo MSRED a capacidade de ser escalável.

Foi desenvolvida a solução tridimensional da equação de difusão-advecção utilizando uma abordagem semi-analítica para uma camada limite atmosférica não homogênea, em que é possível descrever de forma mais realista os perfis de turbulência atmosférica nas três dimensões utilizando os coeficientes de difusividade turbulenta da Teoria K , porém sem um custo computacional elevado e com diminuição dos erros de arredondamento, em comparação com os métodos numéricos de solução tridimensional desta equação. Na mesma solução, foi incorporada a estratégia apresentada por Bianconi e Tamponi (1993) para a descrição da evolução da concentração tridimensional ao longo do tempo, considerando o tempo de liberação do poluente em intervalos de tempo variando de poucos segundos (cerca de 15s) a infinito (liberação contínua). E, a fim de prover a esta solução os coeficientes de difusão turbulenta nas três dimensões, foram incorporadas novas parametrizações da turbulência baseadas no trabalho de Degrazia et al. (2000), para cada condição de estabilidade atmosférica.

Diversas melhorias foram desenvolvidas na modelagem matemática da formação da nuvem de exaustão, cuja caracterização é fundamental por se tratar do termo fonte neste tipo de problema. Tais melhorias visaram uma melhor representação das características da nuvem (como o formato, altura, raio, distância percorrida e tempo de estabilização, dentre outros) em uma camada limite atmosférica não homogênea e discretizada em níveis verticais, para diferentes condições de estabilidade atmosférica e para os diferentes tipos de lançamento de foguetes (normal e abortado). Melhorias também foram feitas no cálculo da velocidade de deposição seca, que passou a ser considerada nos diferentes níveis verticais em que a camada limite atmosférica é discretizada, para diferentes condições de estabilidade atmosférica.

Foram apresentados diversos cenários resultantes da aplicação da modelagem meteorológica realizada com o modelo WRF no modo LES para casos reais, e de seu acoplamento com o modelo MSRED, bem como da modelagem de curto alcance da dispersão da nuvem de exaustão com o modelo MSRED acoplado com o modelo CMAQ para a

avaliação de longo alcance do transporte químico. Este sistema de modelagem foi projetado, desenvolvido, estudado e avaliado para a região do CLA, para diferentes cenários de condições atmosféricas e de tipos de lançamentos. Para a modelagem meteorológica, foi possível verificar sua capacidade de simular os fenômenos atmosféricos pertinentes, em comparação com dados de radissondagem coletados na região do CLA. Porém, como não há dados disponíveis de concentração de poluentes em eventos de lançamentos de foguetes no CLA, foi possível somente avaliar os resultados das modelagens com MSRED e CMAQ de forma qualitativa. Apesar deste fato, as análises dos cenários modelados mostraram a importância de se avaliar o impacto dos contaminantes emitidos durante diferentes cenários de lançamento de foguetes e de condição atmosférica, notadamente no que se refere às regiões habitadas que se encontram no entorno do CLA.

Analizando estes cenários de uma maneira geral, a modelagem de curto alcance mostrou que a nuvem não teria impactado regiões habitadas na primeira hora após o lançamento. Contudo, utilizando a abordagem híbrida desenvolvida neste trabalho, em que o modelo MSRED gera as condições iniciais para entrada no modelo CMAQ para modelagem do transporte químico e avaliação de longo alcance, ficou evidente que após a primeira hora, a nuvem de exaustão poderá impactar, na maioria dos casos, as regiões habitadas que se localizam no entorno do CLA. Este impacto poderá ser em menor ou maior grau dependendo, principalmente, das condições meteorológicas no momento e após o lançamento. Daí, conclui-se com propriedade que a aplicação e utilização integrada do modelo WRF para a geração de cenários meteorológicos passados e futuros (previsão), do modelo MSRED para a simulação da formação e da dispersão de curto alcance da nuvem de exaustão de foguetes, e do modelo CMAQ para a simulação do transporte químico de longo alcance dos contaminantes, em diferentes cenários de meteorologia e de lançamentos, é fundamental e adequada para sua utilização operacional pelo CLA na avaliação e simulação do impacto ambiental de diferentes cenários pré e pós-lançamentos, bem como na determinação de locais de monitoramento no entorno do centro.

Com base nos resultados apresentados, e tendo em vista a metodologia de trabalho proposta e desenvolvida, é certo afirmar que o objetivo principal e os objetivos específicos deste trabalho foram alcançados com sucesso. É importante ressaltar que este sistema de modelagem pode ser aplicado a qualquer caso de lançamento de foguete em qualquer local do mundo, para simulações e análises pré e pós-lançamento dos efeitos ambientais de operações de lançamento de foguetes.

Após a concepção, projeto, desenvolvimento e execução de todo este trabalho, é possível identificar oportunidades de melhorias, tanto na metodologia quanto na execução e avaliação dos resultados aqui apresentados. Posto isto, destacam-se as seguintes recomendações para trabalhos futuros:

- Realizar experimentos em diferentes cenários meteorológicos de eventos de lançamento de foguetes, a fim de se determinar a distância percorrida, altura, raio e tempo de estabilização da nuvem de exaustão, confrontando e validando os dados gerados pelo modelo;
- Realizar campanhas de monitoramento para medir as concentrações dos contaminantes liberados em eventos de lançamentos de foguetes e confrontar com os resultados do sistema modelagem apresentado a fim de validá-los, para diferentes cenários meteorológicos e para diferentes distâncias do CLA, para a avaliação de curto alcance e de picos de curta duração, e para a avaliação de longo alcance;
- Melhorar o cálculo da velocidade de deposição seca, incorporando o termo r_c , com base na literatura disponível e em campanhas de monitoramento realizadas no CLA a fim de se estabelecer um perfil adequado para a velocidade de deposição seca na região;
- Desenvolver o *framework* computacional para a avaliação operacional do impacto de curto e longo alcance da nuvem de exaustão de foguetes, utilizando as tecnologias aqui apresentadas.

7. REFERÊNCIAS

Abernathy, R. N.; Foster, K. L. **Ground Cloud Dispersion Measurements During the Titan IV #K16 at Cape Canaveral Air Station**. The Aerospace Corporation Report No. TR-2000(1490)-1, SMC-TR-00-08, The Aerospace Corporation, El Segundo, CA, EUA, 2000.

Agência Espacial Brasileira (AEB). **PNAE – Programa Nacional de Atividades Espaciais 2012-2021, Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação**. Disponível em <http://www.aeb.gov.br/wp-content/uploads/2013/01/PNAE-Portugues.pdf>, 2013. Acessado em 01/09/2016.

Anderson, J.; McCaleb, R. C. **Toxic Gas Exposure Risks Associated with Potential Shuttle Catastrophic Failure**. NASA/TP—2004–213284, 1-105, 2004.

Arnold, S. L.; Dianic, A. V.; Magnuson, E. G. **The Meteorological And Range Safety Support (MARSS) System: a GIS-based Tool for Launch Area Hazard Prediction and Visualization**. Em: 21st International Conference on Interactive Information Processing Systems (IIPS) for Meteorology, Oceanography, and Hydrology, 85th Annual AMS Meeting, 2005.

Assael, M. J.; Kakosimos, K. E. **Fires, Explosions, and Toxic Gas Dispersions: Effects Calculations and Risk Analysis**. CRC Press, 8a edição, Boca Raton, Florida, EUA, 2010.

Atkinson, R. **Personal review of the air resources board's toxic air contaminant identification list compounds**. University of California, Riverside. Riverside, California, 1995.

Bardina, J.; Rajkumar, T. **Intelligent launch and range operations Virtual test bed (ILRO-VTB)**. Em: Anais da SPIE Enabling technologies for simulation science, vol. 5091 141-148 Florida, EUA, 2003.

Bardina, J.; Thirumalainambi, R. **Modeling and simulation of shuttle launch and range operations**. Technical Report, NASA/CR-2004-211296, Ames Research Center, Moffet Field, California, EUA, 2004.

Bardina, J.; Thirumalainambi, R. **Distributed web-based expert system for launch operations**. Em: Proceedings of the 2005 Winter Simulation Conference, M. E. Kuhl, N. M. Steiger, F. B. Armstrong, and J. A. Joines, eds., EUA, 2005.

Bauer, C.; Koch, A.; Minutolo, A.; Grenard, P. **Engineering model for rocket exhaust plumes verified by CFD results**. Em: 29th ISTS, 2-9 Junho 2013, Japão, 2013.

Baxter, P. J.; Adams P.H.; Aw, T. C.; Cockcroft, A.; Harrington, J.M. **Hunter's Diseases of Occupations**. Arnold, Londres, Vol. 45, No. 2, pp. 123-178. DOI: 10.1016/S0003-4878(00)00067-3. 2000.

Bennett, R. R.; Whimpey, J. R.; Smith-Kent, R.; McDonald, A. J. **Effects of Rocket Exhaust on the Launch Site Environment Stratospheric Ozone**. Em: K. K. Kuo (ed.), “Challenges in Propellants and Combustion”, Begell House, New York, pp. 92–104, 1997.

Bernhardt, P. A.; Baumgardner, J. B.; Bhatt, A.; Coster, A. **Ground and space-based measurement of rocket engine burns in the ionosphere**. Em: Proceedings of the 38th IEEE International Conference Plasma Science (ICOPS) Meeting, Chicago, IL, 2011.

Bianconi, R. e Tamponi, M. **A mathematical model of diffusion from a steady source of short duration in a finite mixing layer**. Atmos. Environ. 27A, 5, 781-792, 1993.

Bjorklund, J. R.; Dumbauld, J.K.; Cheney, C.S.; Geary, H.V. **User’s manual for the REEDM (Rocket Exhaust Effluent Diffusion Model) compute program**. NASA contractor report 3646. NASA George C. Marshall Space Flight Center, Huntsville, AL, 1982.

Bjorklund, J. R. **User instructions for the Real- Time Volume Source Dispersion Model (RTVSM)**. H.E Cramer Company, Inc. Report TR-90-374-02, prepared for U.S. Army Dugway Proving Ground, Dugway, UT, 1990.

Bjorklund, J. R.; Bowers, J. F.; Dodd, G. C.; White, J. M. **Open Burn/Open Detonation Dispersion Model (OBODM) users’ guide, v. 2, Technical description**. West desert test center, US Army Dugway proving ground, Dugway, Utah, 1998.

Blackadar, A. K. **Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences**. Springer-Verlag, 185pp, 1997.

Boçon, F. T. **Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica**. Tese de Doutorado, 290 págs, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil, 1998.

Boyd, B. F.; Fitzpatrick, M. E.; Parks, C. R.; Rosati, P. N.; Lamoreaux, R. W. **Ensuring Environmental Safety For Space Launch**. Em: 12th Conference on Aviation, Range, and Aerospace Meteorology, Paper 8.6, 2006.

Brady B. B.; Martin L. R.; Lang V. I. **Effects of Launch Vehicle Emissions in the Stratosphere, Journal of Spacecraft and Rockets**. Vol. 34, NO. 6, pp. 774-779, 1997.

Briggs G. A. **Plume Rise**. USAEC Critical Review Series, TID-25075, National Technical Information Service, Springfield, Virginia, 22161, EUA, 1969.

Briggs G. A. **Plume Rise Predications, Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analysis**. American Meteorological Society, Boston, Massachusetts, EUA, 1975.

Byun, D.; Schere, K. L. **Review of the Governing Equations, Computational Algorithms, and Other Components of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System**. Appl. Mech. Rev., Vol. 59, pp. 51-77, 2006.

Cencetti, M.; Veilleur, V.; Albergel, A.; Olry, C. **SARRIM: A tool to follow the rocket releases used by the CNES Environment and Safety Division on the European Spaceport**

of Kourou (French Guyana). International Journal of Environment and Pollution, vol. 44, pp. 87-95. DOI: 10.1504/IJEP.2011.038406. 2011.

Centers for Disease Control and Prevention (CDC). **Hydrogen Chloride – Immediately Dangerous to Life or Health Concentrations (IDLH).** The National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH). Georgia, EUA, 2014. Disponível em <http://www.cdc.gov/niosh/idlh/7647010.html>. Acessado em: 01/09/2016.

Chen, C.; Zak, J. A. **A cloud model simulation of space shuttle exhaust clouds in different atmospheric conditions.** Technical Report, NASA-CR-4223, NAS 1.26:4223, ST Systems Corporation, Hampton, Virginia, EUA, 1989.

Costa, C.P.; Vilhena, M.T.; Moreira, D.M.; Tirabassi, T. **Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the PBL.** Atmospheric Environment 40, 5659-5669, 2006.

Cotta, R. **Integral transforms in computational heat and fluid flow.** CRC Press, Boca Raton, Florida, EUA, 352p, 1993.

Denison, M. R.; Lamb, J. J.; Bjorndahl, E. Y.; Lohn, P. D. **Solid Rocket Exhaust in the Stratosphere: Plume Diffusion and Chemical Reactions.** Em: Journal of Spacecraft and Rockets 31 (3), S. 435–442, 1994.

Degrazia, G. A.; Anfossi, D.; Carvalho, J. C.; Mangia, C.; Tirabassi, T.; Campos Velho, H.F. **Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions.** Atmospheric Environment 34, 3575–3583, 2000.

Dellagnezze, R. **Base de Lançamento de Foguetes e a Soberania.** Disponível em http://www.ambito-juridico.com.br/site/index.php?n_link=revista_artigos_leitura&artigo_id=10030, 2014. Acessado em 01/09/2016.

Denison, M. R.; Lamb, J. J.; Bjorndahl, E. Y.; Lohn, P. D. **Solid Rocket Exhaust in the Stratosphere: Plume Diffusion and Chemical Reactions.** Em: Journal of Spacecraft and Rockets 31 (3), S. 435–442, 1994.

Dumbauld, R. K. **Handbook for estimating toxic fuel hazards.** Final Report under Contract No. NAS8-21453, NASA Report CR-61326, Marshall Space Flight Center, Alabama, 1970.

Dumbauld, R. K. **Review of cloud rise problem.** Technical Note submitted to NASA, Marshall Space Flight Center, Alabama, under Contract No. NAS8-26673, 1971.

Dumbauld, R. K.; Bjorklund, R. **Hazard estimates for selected rocket fuel components at Kennedy Space Center.** GCA Technology Division, GCA Corporation, Bedford Park, Massachusetts, 1971.

Dumbauld, R. K.; Bjorklund, J. R.; Bowers, J. F. **NASA/MSFC multilayer diffusion models and computer program for operational prediction of toxic fuel hazards.** NASA

Contractor Report CR-129006, NASA George C. Marshall Space Flight Center, Huntsville, 1973.

Eckman, R. M. **Evaluation of the REEDM climatological turbulence algorithm using aircraft measurements**. Technical report, NOAA Technical Memorandum, OAR=ATDD-234. Air Resources Laboratory, Silver Spring, 2000.

Emery, C.A.; Tai, E.; Yarwood, G. **Enhanced Meteorological Modeling and Performance Evaluation for Two Texas Ozone Episodes**. Prepared for the Texas Natural Resource Conservation Commission. ENVIRON International Corporation, Novato, CA, EUA, 2001.

Evans, R. J. **Delta II Explosion Plume Analysis Report**. NASA Contractor Report. NASA/CR-2000-208582, 2000.

Finlayson-Pitts, B. J.; Pitts, J. N. Jr. **Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere: Theory, Experiments, and Applications**. Academic Press, 1^a ed, San Diego, CA, EUA, 2000.

Fisch, G. **Características do perfil vertical do vento no Centro de Lançamento de Foguetes de Alcântara (CLP)**. Revista Brasileira de Meteorologia, v. 14, p.11-21, 1999.

Gabriel, E.; Faag, G. E.; Bosilca, G.; Angskun, T.; Dongarra, J. J.; Squyres, J. M.; Sahay, V.; Kambadur, P.; Barrett, B.; Lumsdaine, A.; Castain, R. H.; Daniel, D. J.; Graham, R. L.; Woodall, T. S. **Open MPI: Goals, Concept, and Design of a Next Generation MPI Implementation**. Em Proceedings, 11th European PVM/MPI Users' Group Meeting, Budapeste, Hungria, Setembro 2004.

Gisler, C. A. F.; Fisch, G.; Correa, C. S. **Análise estatística do perfil de vento na camada limite superficial no Centro de Lançamento de Alcântara**. Journal of Aerospace Technology and Management, v. 3, n. 2, 193-202. DOI 10.5028/jatm.2011.03022411, 2011.

Gryning, S.E.; Holtslag, A.A.M.; Irwin, J.S.; Siversteen, B. **Applied dispersion modeling based on meteorological scaling parameters**. Atmospheric Environment, 21, 79–89, 1987.

Hanna, S.R.; Drivas, P.J.; e Chang, J.C. **Guidelines for Use of Vapor Cloud Dispersion Models**. AIChE/CCPS, 3 Park Avenue, New York, EUA, 1996.

Hobbs, P. **Introduction to Atmospheric Chemistry**. Cambridge University Press, 2^a ed., New York, EUA, 2000.

Huang, C.H. **A theory of dispersion in turbulent shear flow**. Atmospheric Environment, 13, 453-461, 1979.

Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE). **Censo 2010, Estado do Maranhão, Brasil**. Disponível em http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/populacao/censo2010/tabelas_pdf/total_populacao_maranhao.pdf. Acessado em 01/09/2016.

Iriart, P. G.; Fisch, G. **Uso do Modelo WRF-CHEM para a Simulação da Dispersão de Gases no Centro de Lançamento de Alcântara**. Revista Brasileira de Meteorologia, v. 31, n. 4B, 2016.

Jacobson, M. Z. **Fundamentals of Atmospheric Modeling**. Cambridge University Press, 2^a ed., New York, EUA, 2005.

Koch, A. D.; Bauer, C.; Dumont, E.; Minutolo, F.; Sippel, M.; Grenard, P.; Ordonneau, G.; Winkler, H.; Guénot, L.; Linck, C.; Wood, C. R.; Vira, J.; Sofiev, M.; Tarvainen, V. **Multidisciplinary approach for assessing the atmospheric impact of launchers**. Em: Proceedings of the 4th CEAS Air and Space Conference, 2013.

Lagzi, I.; Mészáros, R.; Gelybó, G.; Leelőssy, Á. **Atmospheric chemistry**. Eötvös Loránd University, Hungria, 2013.

Lide, D. R. **CRC Handbook of Chemistry and Physics**. CRC Press, 84^a ed., Boca Raton, Florida, EUA, 2003.

Mangia, C.; Moreira, D. M.; Schipa, I.; Degrazia, G. A.; Tirabassi, T.; Rizza, U. **Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions**. Atmospheric Environment, 36, 67-76, 2002.

Moreira, D. M.; Degrazia, G. A.; Vilhena, M. T. **Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model**. Il Nuovo Cimento, Vol. 22C, n.5, pp. 685-691, 1999.

Moreira, D. M.; Santos, D. P.; Carvalho, J. C.; Vilhena, M. T.; Degrazia, G. A.; Tirabassi, T. **Solution of the steady K-diffusion equation for ABL dispersion in inhomogeneous turbulence with plume rise**. Brazilian Journal of Meteorology 19, 2, 113-122, 2004.

Moreira, D. M.; Rizza, U.; Vilhena, M. T.; Goulart, A. G. **Semi-analytical model for pollution dispersion in the planetary boundary layer**. Atmospheric Environment, v. 39, No. 14, pp. 2689-2697, 2005a.

Moreira, D. M.; Carvalho, J. C.; Goulart, A. G.; Tirabassi, T. **Simulation of the dispersion of pollutants using two approaches for the case of a low source in the SBL: evaluation of turbulence parameterisations**. Water, Air and Soil Pollution, v. 161, 285-297, 2005b.

Moreira, D. M.; Ferreira Neto, P. V.; Carvalho, J. C. **Analytical solution of the Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation**. Environmental Modelling and Software, v. 20, No. 9, 1159-1165, 2005c.

Moreira, D. M.; Tirabassi, T.; Carvalho, J. C. **Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers**. Atmospheric Environment, v. 39, No. 20, 3643-3650, 2005d.

Moreira, D. M.; Vilhena, M. T.; Tirabassi, T.; Costa, C.; Bodmann, B. **Simulation of pollutant dispersion in the atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach.** Water, Air and Soil Pollution, v. 177, 411-439, 2006.

Moreira, D. M.; Trindade, L. **Manual do Usuário do Modelo MSDEF (Modelo Simulador da Dispersão de Efluentes de Foguetes), Versão 1.0/2010.** Relatório Técnico, CTA/IAE/ACA. 70pp. 2010a.

Moreira, D. M.; Vilhena, M. T. **Air pollution and turbulence: modeling and applications.** CRC Press Taylor, Boca Raton, Florida, EUA, 2010b.

Moreira, D. M.; Tirabassi, T.; Vilhena, M. T.; Goulart, A. G. **A multi-layer model for pollutant dispersion with dry deposition to the ground.** Atmospheric Environment 44, 1859-1865, 2010c.

Moreira, D. M.; Trindade, L. B.; Fisch, G.; Moraes, M. R.; Dorado, R. M.; Guedes, R. L. **A multilayer model to simulate rocket exhaust clouds.** Journal of Aerospace Technology and Management, v. 3, 41-52, 2011.

Moreira, D. M.; Moraes, A. C.; Goulart, A. G.; Albuquerque, T. T. A. **A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance.** Atmospheric Environment 48, 254-259, 2014.

Nappo, C. J.; Essa, K. S. M. **Modeling dispersion from near-surface tracer releases at Cape Canaveral, Florida.** Atmospheric Environment 35, 3999-4010, 2001.

Nascimento, E. G. S.; Moreira, D. M.; Fisch, G.; Albuquerque, T. T. A. **A numerical study of the contaminants dispersion in Alcantara Launch Center.** Em: Proceedings of the 1st Bi-Annual CMAS South America Conference, São Paulo, SP, Brazil, 2013a. Disponível em http://www.lapat.iag.usp.br/aerossol/CMAS/abstracts/Erick_CMAS-abstract.pdf. Acessado em 01/09/2016.

Nascimento, E. G. S.; Moreira, D. M.; Fisch, G.; Albuquerque, T. T. A. **Modeling the Impact of Emissions of HCL During Rocket Launch Events in the Region of Alcantara Launch Center.** Em: Proceedings of the 12th Annual CMAS International Conference, Chapel Hill, NC, EUA, 2013b. Disponível em <https://www.cmascenter.org/conference/2013/agenda.cfm>. Acessado em 01/09/2016.

Nascimento, E. G. S.; Moreira, D. M.; Fisch, G.; Albuquerque, T. T. A. **Simulation of Rocket Exhaust Clouds at the Centro de Lançamento de Alcântara Using the WRF-CMAQ Modeling System.** Journal of Aerospace Technology and Management, v. 6, n. 2, 119-128. DOI: 10.5028/jatm.v6i2.277, 2014.

Nascimento, E. G. S.; Moreira, D. M.; Albuquerque, T. T. A.; Reis, N. C. Jr.; Santos, J. M.; Goulart, E. V.; Fisch, G. **Atmospheric dispersion modeling to simulate rocket exhaust clouds.** Em: Proceedings of the 17th International Conference on Computational Methods and

Experimental Measurements, WIT Transactions on Modelling and Simulation, vol. 59. ISSN:1746-4064, 2015a.

Nascimento, E. G. S.; Moreira, D. M.; Fisch, G.; Albuquerque, T. T. A.; Rosa, L. C.; Pedruzzi, R. **Evaluating the Impact of Large Eddy Simulations in Rocket Exhaust Modeling**. Em: XXXVI Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, Rio de Janeiro. v. 36. DOI: 10.20906/CPS/CILAMCE2015-0438, 2015b.

Nascimento, E. G. S.; Moreira, D. M.; Albuquerque, T. T. A.; Fisch, G. **Integrating short and long range approaches for modeling the dispersion and the chemical transport of rocket exhaust clouds**. Em: 14th Annual CMAS Conference, 2015, Chapel Hill, NC, EUA, 2015c. Disponível em https://www.cmascenter.org/conference/2015/slides/sperandio_integrating_short_2015.pdf. Acessado em 01/09/2016.

Nyman, R. L. **NASA Report: Evaluation of Taurus II Static Test Firing and Normal Launch Rocket Plume Emissions**, 2009.

Otte, T. L.; Pleim, J. E. **The Meteorology-Chemistry Interface Processor (MCIP) for the CMAQ modeling system: updates through MCIPv3.4.1**. Geosci. Model Dev., 3, 243-256, doi:10.5194/gmd-3-243-2010, 2010.

Pellet, G. L.; Sebacher, D. I.; Bendura, R. J.; Wornom, D. E. **HCL in Rocket Exhaust Clouds: Atmospheric Dispersion, Acid Aerosol Characteristics, and Acid Rain Deposition**. Journal of the Air Pollution Control Association, Vol. 33, No. 4, pp. 304-310, Abril, 1983.

Pires, L. B. M.; Avelar, A. C.; Fisch, G.; Roballo, S. T.; Souza, L. F.; Gielow, R.; Girardi, R. **Studies Using Wind Tunnel to Simulate the Atmospheric Boundary Layer at the Alcântara Space Center**. Journal of the Aerospace and Technology Management, Vol. 1, No. 1, pp. 91-98. DOI: 10.5028/jatm. 2009.01019198. 2009.

Rajasekhar, M.; Kumar, M. D.; Subbananthan, T.; Srivastava, V.; Apparao, B.; Rao, V. S.; Prasad, M. **Exhaust dispersion analysis from large solid propellant rocket motor firing using HYSPLIT model over Satish Dhawan Space Centre (SDSC SHAR)**. Em: Indo-US Conference-cum-Workshop on “Air Quality and Climate Research”, ASCI Hyderabad, 2011. doi: 10.13140/2.1.4008.1284.

Schuch, D.; Fisch, G. **The Use of an Atmospheric Model to Simulate the Rocket Exhaust Effluents Transport and Dispersion for the Alcântara Launching Center**. Journal of Aerospace Technology and Management, (no prelo), 2017.

Seinfeld, J. H.; Pandis, S. N. **Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change**. 2ª edição. John Wiley & Sons, Inc. New Jersey, EUA, 2006.

Silva, A. F. G.; Fisch, G. **WRF Model Assessment for the Wind Profile Forecast at the Alcantara Launching Center**. Brazilian Journal of Meteorology, vol. 29, n. 2, pp. 259-270, 2014.

Simmons, F. S. **Rocket Exhaust Plume Phenomenology**. The Aerospace Press, El Segundo, California, EUA, Cap. 2, 2000.

Skamarock, W. C.; Klemp, J. B. **A Time-Split Nonhydrostatic Atmospheric Model for Weather Research and Forecasting Applications**. Journal of Computational Physics, Vol. 227, pp. 3465-3485. DOI:10.1016/j.jcp.2007.01.037. 2008.

Stephens, J. B.; Stewart, R. B. **Rocket exhaust effluent modeling for thopospheric air quality and environmental assessment**. National Aeronautics and Space Administration – NASA Technical Report, 1977.

Stroud, A. H.; Secrest, D. **Gaussian Quadrature Formulas**. Englewood Cliffs, N.J., Prentice Hall, Inc, 1966.

Stull, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Kluwer Academic Publishers, 1988.

Unidata. **Biblioteca netCDF**. Boulder, CO: UCAR/Unidata Program Center, EUA. DOI: doi:10.5065/D6H70CW6, 2015.

U.S. Department of Health and Human Services. **Hazardous Substances Data Bank (HSDB, online database)**. National Toxicology Information Program, National Library of Medicine, Bethesda, MD, EUA, 1993.

U.S. Environmental Protection Agency. **Integrated Risk Information System (IRIS) on Hydrogen Chloride**. National Center for Environmental Assessment, Office of Research and Development, Washington, DC, EUA, 1999.

U.S. Environmental Protection Agency. **EPA-454/B-07-002 - Guidance on the use of Models and Other Analyses for Demonstrating Attainment of Air Quality Goals for Ozone, PM_{2.5}, and Regional Haze**. North Caroline, EUA, 2007.

Voigt, C.; Schumann, U.; Graf, K.; Gottschaldt, K. D. **Impact of rocket exhaust plumes on atmospheric composition and climate — an overview**. EUCASS Proceedings Series – Advances in AeroSpace Sciences, vol. 4, pp. 657-670. DOI: 10.1051/eucass/201304657. 2013.

Wells, J. E.; Black, D. L.; Taylor, C. L. **Development and Validation of a Computational Model for Predicting the Behavior of Plumes from Large Solid Rocket Motors**. ATK Internal Conference, 24-25 de Abril de 2013, Ogden, UT, EUA, 2013.

Wesely, M. L.; Hicks, B. B. **Some factors that affect the deposition rates of sulfur dioxide and similar gases on vegetation**. J. Air Pollut. Control Assoc., 27, 1110–1116, 1977.

Zannetti, P. **Air Pollution Modelling**, Computational Mechanics Publications, Southampton, U.K. and Van Nostrand Reinhold, NY, EUA, 1990.